

## Una mirada a la mecánica cuántica

Los modelos matemáticos en la mecánica cuántica han atraído la atención de numerosos investigadores a lo largo del último siglo. Con este trabajo se pretende dar una idea sobre algunos de los aspectos más esenciales de dichos modelos. El tema principal de estas notas gira en torno al principio de incertidumbre y a las ecuaciones de Schrödinger y Dirac, conceptos que se han convertido en parte importante de la educación de los físicos teóricos. Se desarrollan temas tales como las desigualdades de Hardy, operadores simétricos y extensiones auto-adjuntas, el teorema de descomposición espectral, el teorema de Cauchy-Kovalevskaya y scattering de neutrones. Este libro es adecuado para estudiantes de posgrado interesados en las matemáticas involucradas en la mecánica cuántica.

Leyter Potenciano

Los miembros del grupo de Análisis Matemático y Aplicaciones del Departamento de Matemáticas de la Universidad del País Vasco (UPV/EHU) que han participado en la creación de este libro son, por orden alfabético: Naiara Arrizabalaga, Aingeru Fernández, Albert Mas, Santiago Montaner, Leyter Potenciano, Odei Rey, Luis Urrutia y Luis Vega.



978-3-659-07608-4

editorial académica española

ead  
editorial académica española

Una mirada a la mecánica cuántica



Leyter Potenciano (Ed.)

## Una mirada a la mecánica cuántica

Principio de incertidumbre y ecuaciones de Schrödinger y de Dirac

Potenciano (Ed.)

# Introducción

Estas notas fueron tomadas durante el otoño de 2012, en el departamento de Matemáticas de la Universidad del País Vasco, con motivo de un curso llevado a cabo por el grupo de Análisis Matemático y Aplicaciones, parcialmente financiado por el proyecto IT-305-07 del Gobierno Vasco<sup>1</sup>. El tema principal gira en torno al principio de incertidumbre y a las ecuaciones de Schrödinger y Dirac, dentro del cual se desarrollaron conceptos tales como las desigualdades de Hardy, operadores simétricos y extensiones auto-adjuntas, el teorema de descomposición espectral, el teorema de Cauchy-Kovalevskaya y el scattering de neutrones.

En el capítulo 1 se muestra, entre otras cosas, una desigualdad abstracta del principio de incertidumbre y algunas aplicaciones, una desigualdad de tipo Hardy-Dirac que se utiliza en el capítulo siguiente y un teorema virial para la ecuación de Schrödinger. En la última sección se compara la ecuación del calor con la de Schrödinger. En el capítulo 2 se prueban dos teoremas, en el primero se estudia la existencia y unicidad de solución de la ecuación de Dirac con potenciales con singularidad en el origen, y en el segundo se construye una extensión auto-adjunta para el operador de Dirac con un potencial electromagnético con singularidad tipo Coulomb. Para este último se utiliza el criterio básico del auto-adjunto y la desigualdad tipo Hardy-Dirac que se prueba en el capítulo anterior. El capítulo 3 se centra en la construcción de extensiones auto-adjuntas del operador de Dirac acoplado a potenciales con soporte en una superficie dada y se dan algunos ejemplos. Dichas extensiones se construyen a mano a partir de ciertos valores frontera y unos operadores auxiliares definidos en la superficie. En el capítulo 4 se prueba que, si la solución de la ecuación de Schrödinger con un cierto potencial posee decaimiento Gaussiano en tiempo  $t = 0$  y  $t = 1$ , entonces, la solución también hereda esta propiedad para todo tiempo intermedio, utilizando propiedades de convexidad logarítmica para ecuaciones que se descomponen como suma de una parte simétrica y otra antisimétrica. El capítulo 5 es el apéndice de algunos resultados asumidos al

---

<sup>1</sup>Arrizabalaga fue parcialmente financiada por MTM2011-24054, Fernández fue financiado por BFI2011-11 del programa predoctoral de la Dirección de Política Científica del Departamento de Educación, Política Lingüística y Cultura del Gobierno Vasco, Mas fue financiado por MTM2010-16232, 2009SGR-000420, IT-305-07, Montaner fue financiado por MTM2011-24054, IT-305-07 y Vega por MTM2011-24054, UFI11-52, IT-305-07.

desarrollar los capítulos anteriores. En la primera sección se prueba el teorema espectral para operadores auto-adjuntos no acotados. En la segunda se prueba un criterio que caracteriza cuando un operador simétrico es auto-adjunto. la tercera sección contiene el teorema de Cauchy-Kovalevskaya, y la cuarta explica el fenómeno de dispersión al trabajar con neutrones y su relación con la ecuación de Schrödinger con un potencial.

Los capítulos 1, 2 y 3 fueron impartidos en el curso por Luis Vega, Naiara Arrizabalaga y Albert Mas, respectivamente, y redactados para estas notas por Leyter Potenciano. El capítulo 4 fue impartido y redactado por Aingeru Fernández. Respecto al capítulo 5, las secciones 1, 2, 3 y 4 fueron impartidas y redactadas por Luis Urrutia, Leyter Potenciano, Santiago Montaner y Odei Rey, respectivamente.

Se debe mencionar que este trabajo es un compendio de varios resultados ya existentes en la literatura, de los cuales algunos han sido publicados por miembros del grupo (cada capítulo contiene las referencias correspondientes). En este sentido, estas notas no reclaman la autoría de ninguno de los resultados presentados en la misma, su caracter es meramente expositorio.

*Primavera de 2013.*

# Índice general

|                                                                                |           |
|--------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1. Principio de incertidumbre y aplicación a la ecuación de Dirac</b>       | <b>1</b>  |
| 1.1. Principio de Incertidumbre . . . . .                                      | 1         |
| 1.2. Ecuación de Dirac . . . . .                                               | 5         |
| 1.3. Teorema Virial . . . . .                                                  | 13        |
| 1.4. Ecuación del calor vs Ecuación de Schrödinger . . . . .                   | 21        |
| <b>2. Extensiones autoadjuntas del operador de Dirac I</b>                     | <b>23</b> |
| 2.1. Operador de Dirac y extensiones auto-adjuntas . . . . .                   | 23        |
| 2.2. Existencia y unicidad de solución de una EDP . . . . .                    | 26        |
| 2.3. Extensiones auto-adjuntas con potenciales de Coulomb . . . . .            | 35        |
| 2.4. Ejemplos . . . . .                                                        | 36        |
| <b>3. Extensiones autoadjuntas del operador de Dirac II</b>                    | <b>39</b> |
| 3.1. Escenario y objetivo . . . . .                                            | 39        |
| 3.2. Solución Fundamental de $H$ . . . . .                                     | 40        |
| 3.3. El corazón del asunto . . . . .                                           | 42        |
| <b>4. Convexidad logarítmica de la ecuación de evolución de Schrödinger</b>    | <b>51</b> |
| <b>5. Apéndice</b>                                                             | <b>69</b> |
| 5.1. El Teorema Espectral para operadores autoadjuntos . . . . .               | 69        |
| 5.1.1. El Teorema Espectral para operadores autoadjuntos no acotados . . . . . | 71        |
| 5.2. Caracterización de operadores autoadjuntos . . . . .                      | 74        |
| 5.2.1. Operadores simétrico y autoadjunto. Criterios . . . . .                 | 75        |
| 5.2.2. Ejemplo. Operador simétrico pero no autoadjunto . . . . .               | 78        |
| 5.3. El Teorema del Cauchy-Kowalevski . . . . .                                | 79        |
| 5.3.1. Notación . . . . .                                                      | 80        |
| 5.3.2. Funciones analíticas de variable real . . . . .                         | 80        |
| 5.3.3. Teorema de Cauchy-Kowalesvki . . . . .                                  | 84        |

|                                                                                                                           |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 5.4. Scattering de neutrones: ESS . . . . .                                                                               | 87 |
| 5.4.1. ¿Qué es la ESS? ( <a href="http://www.europeanspallationsource.se">www.europeanspallationsource.se</a> ) . . . . . | 87 |
| 5.4.2. Dinámica de espalación o scattering de neutrones . . . . .                                                         | 87 |
| 5.4.3. Propiedades básicas del neutrón . . . . .                                                                          | 88 |
| 5.4.4. Dualidad onda-partícula . . . . .                                                                                  | 88 |
| 5.4.5. Teoría de la dispersión ó scattering . . . . .                                                                     | 89 |
| 5.4.6. Proceso de dispersión . . . . .                                                                                    | 89 |
| 5.4.7. Dispersión elástica e inelástica . . . . .                                                                         | 90 |
| 5.4.8. Dispersión elástica . . . . .                                                                                      | 91 |

|                     |           |
|---------------------|-----------|
| <b>Bibliografía</b> | <b>95</b> |
|---------------------|-----------|

# Capítulo 1

## Principio de incertidumbre y aplicación a la ecuación de Dirac

En este capítulo se asume que el lector está familiarizado con Teoría de Espacios de Hilbert, Teoría de Operadores, Ecuación del Calor y Ecuación de Schrödinger. Para estos temas ver, por ejemplo, ([8], [17], [20], [26], [25]). Para mayores detalles de los resultados mostrados, consultar los artículos ([14], [15]) y las referencias contenidas en los mismos.

### 1.1. Principio de Incertidumbre

En un espacio de Hilbert  $H$ , consideramos los operadores  $S$  y  $A$ , simétrico y antisimétrico, respectivamente; es decir

$$\langle S\psi, \psi \rangle = \langle \psi, S\psi \rangle \quad , \quad \langle A\psi, \psi \rangle = -\langle \psi, A\psi \rangle.$$

Entonces,

$$\begin{aligned} 0 \leq \| (A + S)\psi \|^2 &= \langle S\psi, S\psi \rangle + \langle A\psi, A\psi \rangle + \langle S\psi, A\psi \rangle + \langle A\psi, S\psi \rangle \\ &= \langle S\psi, S\psi \rangle + \langle A\psi, A\psi \rangle + 2\operatorname{Re}\langle S\psi, A\psi \rangle \\ &= \langle S\psi, S\psi \rangle + \langle A\psi, A\psi \rangle + \langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle. \end{aligned}$$

Por lo tanto

$$-\langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle \leq \|S\psi\|^2 + \|A\psi\|^2. \quad (1.1)$$

Análogamente, si cambiamos  $A$  por  $-A$ , obtenemos

$$\langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle \leq \|S\psi\|^2 + \|A\psi\|^2. \quad (1.2)$$

Combinando (1.1) y (1.2), obtenemos la siguiente desigualdad

$$|\langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle| \leq \|S\psi\|^2 + \|A\psi\|^2. \quad (1.3)$$

En (1.3), cambiando  $A$  por  $\lambda A$  y  $S$  por  $\frac{1}{\lambda}S$ , se tiene

$$|\langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle| \leq \frac{1}{\lambda^2} \|S\psi\|^2 + \lambda^2 \|A\psi\|^2 \leq 2 \|S\psi\| \|A\psi\| \quad (1.4)$$

En la última desigualdad hemos tomado  $\frac{1}{\lambda^2} = \frac{\|A\psi\|}{\|S\psi\|}$ . Esto es debido a que la función  $f(\lambda) = \frac{1}{\lambda^2} \|S\psi\|^2 + \lambda^2 \|A\psi\|^2$ , alcanza su mínimo en ese valor. Más aún,

$$|\langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle| \leq 2 \|S\psi\| \|A\psi\|. \quad (1.5)$$

La desigualdad (1.5), se denomina **Principio de Incertidumbre**. Por otro lado, se cumple la igualdad en (1.1) si y solo si

$$(A + S)\psi = 0. \quad (1.6)$$

Además, sin pérdida de generalidad, se puede cambiar  $A$  por  $A - \langle A\psi, \psi \rangle I$  y  $S$  por  $S - \langle S\psi, \psi \rangle I$ . A continuación, mostramos algunos ejemplos de aplicación. En todos ellos, los cálculos son formales.

**Ejemplo 1** En el espacio  $L^2(\mathbb{R})$ , consideramos los operadores

$$S\psi = x\psi, \quad A\psi = \frac{d}{dx}\psi.$$

Es claro que el operador  $S$  es simétrico y, por integración por partes,  $A$  es antisimétrico. A continuación calculamos su respectivo conmutador

$$(SA - AS)\psi = \left(x \frac{d}{dx} - \frac{d}{dx} x\right) \psi = x \frac{d}{dx} \psi - \frac{d}{dx} (x\psi) = x \frac{d}{dx} \psi - x \frac{d}{dx} \psi - \psi = -\psi.$$

De (1.1) y (1.4), obtenemos las desigualdades

$$-\langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle = \int |\psi|^2 \leq \int |x\psi|^2 + \int |\psi'|^2, \quad (1.7)$$

y

$$-\langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle = \int |\psi|^2 \leq 2 \left( \int |x\psi|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left( \int |\psi'|^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

De la ecuación (1.6), se cumple la igualdad si y solo si la función  $\psi$  cumple la ecuación diferencial (EDO):  $\frac{d}{dx}\psi = -x\psi$ . Entonces,  $\psi_0 = a_0 e^{-x^2/2}$  verifica la igualdad. Por otro lado, se cumple

$$0 = \langle (A + S)\psi, (A + S)\psi \rangle = \langle (S - A)(S + A)\psi, \psi \rangle = \langle (S^2 - A^2 + SA - AS)\psi, \psi \rangle,$$

así,  $\psi_0$  cumple las siguientes igualdades

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi_0 + x^2\psi_0 = \psi_0, \quad \int |x\psi_0|^2 + \int |\psi_0'|^2 = \int |\psi_0|^2. \quad (1.8)$$

Sea  $\lambda$  un autovalor asociado a el oscilador armónico  $-\frac{d^2}{dx^2} + x^2$ . Entonces, por la ecuación (1.7),  $\lambda \geq 1$ . Por (1.8), el autovalor  $\lambda_0 = 1$  se alcanza en  $\psi_0$ . Por lo tanto, hemos hallado la primera autofunción asociada al oscilador armónico.

**Ejemplo 2** En el espacio  $L^2(\mathbb{R})$ , consideramos los operadores

$$S\psi = \operatorname{sgn}(x)\psi, \quad A\psi = \frac{d}{dx}\psi.$$

El operador  $S$  es simétrico y, por integración por partes,  $A$  es antisimétrico. A continuación calculamos su respectivo conmutador

$$(SA - AS)\psi = \operatorname{sgn}(x)\frac{d}{dx}\psi - \frac{d}{dx}(\operatorname{sgn}(x)\psi) = \operatorname{sgn}(x)\frac{d}{dx}\psi - \operatorname{sgn}(x)\frac{d}{dx}\psi - \frac{d}{dx}\operatorname{sgn}(x)\psi = -2\delta_0\psi.$$

De (1.1), obtenemos la desigualdad

$$-\langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle = -\int -2\delta_0\psi\bar{\psi} = 2|\psi(0)|^2 \leq \int |\psi|^2 + \int |\psi'|^2. \quad (1.9)$$

De la ecuación (1.6), se cumple la igualdad si y solo si la función  $\psi$  cumple la EDO  $\frac{d}{dx}\psi = -\operatorname{sgn}(x)\psi$ . Entonces,  $\psi_0 = a_0e^{-|x|}$  verifica la igualdad. Por otro lado, se cumple

$$0 = \langle (A + S)\psi, (A + S)\psi \rangle = \langle (S - A)(S + A)\psi, \psi \rangle = \langle (S^2 - A^2 + SA - AS)\psi, \psi \rangle,$$

así,  $\psi_0$  cumple las siguientes igualdades

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi_0 - 2\delta_0\psi = -\psi, \quad 2|\psi_0(0)|^2 = \int |\psi_0|^2 + \int |\psi_0'|^2. \quad (1.10)$$

Sea  $\lambda$  un autovalor asociado a el operador  $H = -\frac{d^2}{dx^2} - 2\delta_0$ . Entonces, por la ecuación (1.9),  $\lambda \geq -1$ . Por (1.10), el autovalor  $\lambda_0 = -1$ , se alcanza en  $\psi_0$ . Por lo tanto, hemos encontrado la primera autofunción asociada al operador  $H$ .

**Ejemplo 3** En el espacio  $L^2(\mathbb{R}^d)$  con  $d > 1$ , consideramos los operadores

$$S\psi = \frac{x}{|x|}\psi, \quad A\psi = \nabla\psi.$$

El operador  $S$  es simétrico y, por integración por partes,  $A$  es antisimétrico. A continuación calculamos su respectivo conmutador

$$(SA - AS)\psi = \frac{x}{|x|}\nabla\psi - \nabla\left(\frac{x}{|x|}\psi\right) = \frac{x}{|x|}\nabla\psi - \frac{x}{|x|}\nabla\psi - \nabla\left(\frac{x}{|x|}\right)\psi = -\frac{d-1}{|x|}\psi.$$

De (1.1), obtenemos la desigualdad

$$-\langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle = \int \frac{d-1}{|x|} |\psi|^2 \leq \int |\psi|^2 + \int |\nabla \psi|^2. \quad (1.11)$$

De la ecuación (1.6), se cumple la igualdad si y solo si la función  $\psi$  cumple la EDO:  $\nabla \psi = -\frac{x}{|x|} \psi$ . Entonces,  $\psi_0 = a_0 e^{-|x|}$  verifica la igualdad. Por otro lado, se cumple

$$0 = \langle (A + S)\psi, (A + S)\psi \rangle = \langle (S - A)(S + A)\psi, \psi \rangle = \langle (S^2 - A^2 + SA - AS)\psi, \psi \rangle,$$

así,  $\psi_0$  cumple las siguientes igualdades

$$-\Delta \psi_0 - \frac{d-1}{|x|} \psi_0 = -\psi_0, \quad \int \frac{d-1}{|x|} |\psi_0|^2 = \int |\psi_0|^2 + \int |\nabla \psi_0|^2. \quad (1.12)$$

Sea  $\lambda$  un autovalor asociado a el operador  $H = -\Delta \psi - \frac{d-1}{|x|} \psi$ . Entonces, por la ecuación (1.13),  $\lambda \geq -1$ . Por (1.12), el autovalor  $\lambda_0 = -1$ , se alcanza en  $\psi_0$ . Por lo tanto, hemos encontrado la primera autofunción asociada al operador  $H$ .

**Ejemplo 4** En el espacio  $L^2(\mathbb{R}^d)$  con  $d > 2$ , consideramos los operadores

$$S\psi = \frac{x}{|x|^2} \psi, \quad A\psi = \nabla \psi.$$

El operador  $S$  es simétrico y, por integración por partes,  $A$  es antisimétrico. A continuación calculamos su respectivo conmutador

$$(SA - AS)\psi = \frac{x}{|x|^2} \nabla \psi - \nabla \left( \frac{x}{|x|^2} \psi \right) = \frac{x}{|x|^2} \nabla \psi - \frac{x}{|x|^2} \nabla \psi - \nabla \left( \frac{x}{|x|^2} \right) \psi = -\frac{d-2}{|x|^2} \psi.$$

De (1.1) y (1.4), obtenemos las desigualdades

$$-\langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle = (d-2) \int \frac{|\psi|^2}{|x|^2} \leq \int \frac{|\psi|^2}{|x|^2} + \int |\nabla \psi|^2, \quad (1.13)$$

y

$$-\langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle = (d-2) \int \frac{|\psi|^2}{|x|^2} \leq 2 \left( \int \frac{|\psi|^2}{|x|^2} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \int |\nabla \psi|^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Despejando, obtenemos

$$\int \frac{|\psi|^2}{|x|^2} \leq \frac{4}{(d-2)^2} \int |\nabla \psi|^2. \quad (1.14)$$

## 1.2. Ecuación de Dirac

Consideramos la ecuación  $\partial_t \psi = (\alpha \cdot \nabla + im\beta)\psi$ . Derivando con respecto al tiempo y usando la notación de sumación de Einstein, obtenemos

$$\begin{aligned}\partial_t^2 &= (\alpha \cdot \nabla + im\beta)(\alpha \cdot \nabla + im\beta) = (\alpha_j \partial_j + im\beta)(\alpha_k \partial_k + im\beta) \\ &= (\alpha_j \partial_j \alpha_k \partial_k + im\beta \alpha_k \partial_k + \alpha_j \partial_j im\beta - m^2 \beta^2)\end{aligned}$$

Deseamos que este operador sea el operador que define la ecuación de ondas:  $\partial_t^2 = \Delta - m^2$ ; por lo cual imponemos las siguientes condiciones:

$$\alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j = 2\delta_{jk} \quad , \quad \beta \alpha_k + \alpha_k \beta = 0, \quad (1.15)$$

y

$$\beta^2 = \mathbb{I}_d \quad , \quad \alpha_j^* = \alpha_j \quad , \quad \beta^* = \beta, \quad (1.16)$$

donde

$$\alpha_j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix}, \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{I}_2 \end{pmatrix}. \quad (1.17)$$

A continuación, unos resultados técnicos que usaremos en la demostración del teorema principal, una desigualdad de tipo Hardy.

**Lema 1.2.1** *Se cumplen las siguientes igualdades:*

1.  $\sigma_j \sigma_k = i\varepsilon_{jkl} \sigma_l$ , donde

$$\varepsilon_{jkl} = \begin{cases} 1 & \text{permutación par de } (1, 2, 3), \\ -1 & \text{permutación impar de } (1, 2, 3), \\ 0 & \text{índice repetido al menos dos veces.} \end{cases}$$

2.  $\sigma \cdot A \sigma \cdot B = A \cdot B + i\sigma \cdot (A \wedge B)$ .

3.  $\sigma \cdot \frac{x}{|x|} \sigma \cdot \nabla = \frac{x}{|x|} \nabla + \frac{i\sigma}{|x|} \cdot (x \wedge \nabla)$ .

4. Si  $L = \frac{1}{i} x \wedge \nabla$ . Entonces

$$\sigma \cdot \nabla \sigma \cdot \frac{x}{|x|} - \sigma \cdot \frac{x}{|x|} \sigma \cdot \nabla = \frac{2}{r} (\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L).$$

5.  $(\sigma \cdot L)^2 + \sigma \cdot L = L^2$ .

6.

$$\begin{aligned}\sigma \cdot \nabla (\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L) + (\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L) \sigma \cdot \nabla &= 0. \\ \sigma \cdot \frac{x}{|x|} (\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L) + (\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L) \sigma \cdot \frac{x}{|x|} &= 0.\end{aligned}$$

7.  $(\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L)^2 \geq \mathbb{I}_2$ , es decir,  $\langle (\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L)^2 \psi, \psi \rangle \geq \langle \psi, \psi \rangle$ .

### Demostración:

1. Se puede verificar para cada índice.

2. Usando la igualdad del item 1.

$$\begin{aligned}\sigma \cdot A \sigma \cdot B &= (\sigma_j a_j)(\sigma_k b_k) = \sigma_j a_j \sigma_j b_j + \sum_{j \neq k} \sigma_j \sigma_k a_j b_k \\ &= A \cdot B + i \sum_{j \neq k} \varepsilon_{jkl} \sigma_l a_j b_k = A \cdot B + i \sigma \cdot (A \wedge B).\end{aligned}$$

3. Tomando  $A = \frac{x}{|x|}$  y  $B = \nabla$ , y usando la igualdad del item 2, se tiene

$$\sigma \cdot \frac{x}{|x|} \sigma \cdot \nabla = \frac{x}{|x|} \nabla + i \sigma \cdot \left( \frac{x}{|x|} \wedge \nabla \right) = \frac{x}{|x|} \nabla + \frac{i \sigma}{|x|} \cdot (x \wedge \nabla).$$

4. Análogamente, usando la igualdad del item 2, obtenemos

$$\begin{aligned}\sigma \cdot \nabla \sigma \cdot \frac{x}{|x|} - \sigma \cdot \frac{x}{|x|} \sigma \cdot \nabla &= \nabla \frac{x}{|x|} + i \sigma \cdot \left( \nabla \wedge \frac{x}{|x|} \right) - \frac{x}{|x|} \nabla - i \sigma \cdot \left( \frac{x}{|x|} \wedge \nabla \right) \\ &= \nabla \frac{x}{|x|} - \frac{x}{|x|} \nabla - 2i \sigma \cdot \left( \frac{x}{|x|} \wedge \nabla \right) \\ &= \frac{2}{|x|} + \frac{2}{|x|} \sigma \cdot L = \frac{2}{r} (\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L).\end{aligned}$$

5. Desde que  $L \wedge L = iL$ , obtenemos

$$(\sigma \cdot L)^2 = \sigma \cdot L \sigma \cdot L = L \cdot L + i \sigma \cdot (L \wedge L) = L^2 - \sigma \cdot L.$$

6. Primeramente probamos la anticonmutatividad de  $\sigma \cdot \nabla$  y  $\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L$ . Haciendo las cuentas, obtenemos

$$\sigma \cdot \nabla (\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L) + (\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L) \sigma \cdot \nabla = 2\sigma \cdot \nabla + \sigma \cdot \nabla \sigma \cdot L + \sigma \cdot L \sigma \cdot \nabla,$$

de esta igualdad, bastará probar que  $\sigma \cdot \nabla \sigma \cdot L + \sigma \cdot L \sigma \cdot \nabla = -2\sigma \cdot \nabla$ . Usando la identidad del item 1, se tiene

$$\sigma \cdot \nabla \sigma \cdot L + \sigma \cdot L \sigma \cdot \nabla = \nabla \cdot L + i \sigma \cdot (\nabla \wedge L) + L \cdot \nabla + i \sigma \cdot (L \wedge \nabla) \quad (1.18)$$

A continuación reducimos uno a uno los sumandos de la ecuación (1.18).

- Como estamos trabajando en  $\mathbb{R}^3$ , denotamos  $x = (x_1, x_2, x_3)$ , entonces

$$L = -ix \wedge \nabla = -i \begin{vmatrix} i & j & k \\ x_1 & x_2 & x_3 \\ \partial_1 & \partial_2 & \partial_3 \end{vmatrix} = -i(x_2\partial_3 - x_3\partial_2, x_3\partial_1 - x_1\partial_3, x_1\partial_2 - x_2\partial_1)$$

- Entonces, usando la igualdad  $\partial_i\partial_j = \partial_j\partial_i$ , se tiene

$$\nabla \cdot L = -i(x_2\partial_1\partial_3 - x_3\partial_1\partial_2) - i(x_3\partial_2\partial_1 - x_1\partial_2\partial_3) - i(x_1\partial_3\partial_2 - x_2\partial_3\partial_1) = 0. \quad (1.19)$$

- Análogamente

$$\begin{aligned} L \cdot \nabla &= -i(x_2\partial_3 - x_3\partial_2)\partial_1 - i(x_3\partial_1 - x_1\partial_3)\partial_2 - i(x_1\partial_2 - x_2\partial_1)\partial_3 \\ &= -i(x_2\partial_3\partial_1 - x_3\partial_2\partial_1) - i(x_3\partial_1\partial_2 - x_1\partial_3\partial_2) - i(x_1\partial_2\partial_3 - x_2\partial_1\partial_3) = 0. \end{aligned} \quad (1.20)$$

•

$$\begin{aligned} \nabla \wedge L &= -i\nabla \wedge (x \wedge \nabla) = -i \begin{vmatrix} i & j & k \\ \partial_1 & \partial_2 & \partial_3 \\ x_2\partial_3 - x_3\partial_2 & x_3\partial_1 - x_1\partial_3 & x_1\partial_2 - x_2\partial_1 \end{vmatrix} \\ &= -i(\partial_2(x_1\partial_2 - x_2\partial_1) - \partial_3(x_3\partial_1 - x_1\partial_3), \partial_3(x_2\partial_3 - x_3\partial_2) - \partial_1(x_1\partial_2 - x_2\partial_1), \\ &\quad \partial_1(x_3\partial_1 - x_1\partial_3) - \partial_2(x_2\partial_3 - x_3\partial_2)) \\ &= -i(x_1(\partial_2^2 + \partial_3^2) - 2\partial_1 - x_2\partial_2\partial_1 - x_3\partial_3\partial_1, \\ &\quad x_2(\partial_3^2 + \partial_1^2) - 2\partial_2 - x_3\partial_3\partial_2 - x_1\partial_1\partial_2, \\ &\quad x_3(\partial_1^2 + \partial_2^2) - 2\partial_3 - x_1\partial_1\partial_3 - x_2\partial_2\partial_3). \end{aligned}$$

•

$$\begin{aligned} \nabla \cdot L &= -i(x \wedge \nabla) \wedge \nabla = -i \begin{vmatrix} i & j & k \\ x_2\partial_3 - x_3\partial_2 & x_3\partial_1 - x_1\partial_3 & x_1\partial_2 - x_2\partial_1 \\ \partial_1 & \partial_2 & \partial_3 \end{vmatrix} \\ &= -i(x_3\partial_1\partial_3 - x_1\partial_3^2 - x_1\partial_2^2 + x_2\partial_1\partial_2, x_1\partial_2\partial_1 - x_2\partial_1^2 - x_2\partial_3^2 + x_3\partial_2\partial_3, \\ &\quad x_2\partial_3\partial_2 - x_3\partial_2^2 - x_3\partial_1^2 + x_1\partial_3\partial_1) \end{aligned}$$

- De las dos últimas identidades se sigue que

$$i\sigma \cdot (\nabla \wedge L) + i\sigma \cdot (L \wedge \nabla) = \sigma_1(-2\partial_1) + \sigma_2(-2\partial_2) + \sigma_3(-2\partial_3) = -2\sigma \cdot \nabla. \quad (1.21)$$

Reemplazando en (1.18), las igualdades (1.19), (1.20) y (1.21), obtenemos

$$\sigma \cdot \nabla \sigma \cdot L + \sigma \cdot L \sigma \cdot \nabla = -2\sigma \cdot \nabla,$$

de lo cual se sigue la primera igualdad del ítem 6.

A continuación, probamos la segunda igualdad del ítem 6. Desde que

$$\sigma \cdot \nabla (e^{-|x|} f) = \sigma \cdot \left( -\frac{x}{|x|} e^{-|x|} f + e^{-|x|} \nabla f \right) = -e^{-|x|} \sigma \cdot \frac{x}{|x|} f + e^{-|x|} \sigma \cdot \nabla f,$$

se cumple la identidad

$$\sigma \cdot \frac{x}{|x|} = -e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|}) + \sigma \cdot \nabla. \quad (1.22)$$

Denotamos  $A = \sigma \cdot \frac{x}{|x|} (\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L) + (\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L) \sigma \cdot \frac{x}{|x|}$ . Entonces, aplicando repetidas veces la igualdad (1.22), se tiene

$$\begin{aligned} A &= 2\sigma \cdot \frac{x}{|x|} + \sigma \cdot \frac{x}{|x|} \cdot \sigma \cdot L + \sigma \cdot L \sigma \cdot \frac{x}{|x|} \\ &= 2(-e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|}) + \sigma \cdot \nabla) + (-e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|}) + \sigma \cdot \nabla) \sigma \cdot L \\ &\quad + \sigma \cdot L (-e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|}) + \sigma \cdot \nabla) \\ &= -2e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|}) + 2\sigma \cdot \nabla - e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|} \sigma \cdot L) + \sigma \cdot \nabla \sigma \cdot L \\ &\quad - \sigma \cdot L (e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|})) + \sigma \cdot L \sigma \cdot \nabla \\ &= -2e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|}) - e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|} \sigma \cdot L) - \sigma \cdot L (e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|})) \\ &= -2e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|}) + \sigma \cdot \frac{x}{|x|} \sigma \cdot L - \sigma \cdot \nabla \sigma \cdot L - e^{|x|} \sigma \cdot L \cdot \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|}) \\ &= -e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|}) - e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|}) - e^{|x|} \sigma \cdot L \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|}) \\ &\quad + \sigma \cdot \frac{x}{|x|} \sigma \cdot L - \sigma \cdot \nabla \sigma \cdot L \\ &= -e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|}) - e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (\mathbb{I}_d + \sigma \cdot L) (e^{-|x|}) + \sigma \cdot \frac{x}{|x|} \sigma \cdot L - \sigma \cdot \nabla \sigma \cdot L \\ &= -e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|}) + e^{|x|} (\mathbb{I}_d + \sigma \cdot L) \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|}) + \sigma \cdot \frac{x}{|x|} \sigma \cdot L - \sigma \cdot \nabla \sigma \cdot L \\ &= -e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|}) + e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|}) + e^{|x|} \sigma \cdot \nabla \sigma \cdot L (e^{-|x|}) \\ &\quad + \sigma \cdot \frac{x}{|x|} \sigma \cdot L - \sigma \cdot \nabla \sigma \cdot L \\ &= e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|} \sigma \cdot L) + \sigma \cdot \frac{x}{|x|} \sigma \cdot L - \sigma \cdot \nabla \sigma \cdot L \\ &= \left( e^{|x|} \sigma \cdot \nabla (e^{-|x|}) + \sigma \cdot \frac{x}{|x|} - \sigma \cdot \nabla \right) (\sigma \cdot L) = 0 \end{aligned}$$

7. Sea  $\lambda$  un autovalor del operador  $\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L$  asociado a la autofunción  $\psi$ , es decir:

$$(\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L) \psi = \lambda \psi.$$

Entonces, por el ítem 6, se obtiene la igualdad

$$(\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L) \left( \sigma \cdot \frac{x}{|x|} \right) \psi = -\sigma \cdot \frac{x}{|x|} (\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L) \psi = -\sigma \cdot \frac{x}{|x|} (\lambda \psi) = -\lambda \sigma \cdot \frac{x}{|x|} \psi. \quad (1.23)$$

Luego,  $-\lambda$  también es un autovalor de  $\mathbb{I}_d + \sigma \cdot L$ , asociado a la autofunción  $\sigma \cdot \frac{x}{|x|} \psi$ .

Así, aplicando el teorema espectral al operador  $\sigma \cdot L$ , obtenemos

$$\text{spec}\{ \sigma \cdot L \} = \{ -\lambda_j \}_{j \in \mathbb{N}} \cup \{ \mu_k \}_{k \in \mathbb{N}}, \quad \lambda_j, \mu_k > 0.$$

Del ítem 5, se sigue que  $(\sigma \cdot L)^2 + \sigma \cdot L \geq 0$ , entonces

$$0 \leq \langle ((\sigma \cdot L)^2 + \sigma \cdot L) \psi_j, \psi_j \rangle = \langle \lambda_j^2 \psi_j - \lambda_j \psi_j, \psi_j \rangle = \lambda_j^2 - \lambda_j = \lambda_j(\lambda_j - 1).$$

Así,  $\lambda_j > 1$  para todo  $j \in \mathbb{N}$ . Entonces, desde que  $\lambda_j - 1$  y  $1 + \mu_k$  son autovalores positivos de  $\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L$ , para cada  $j \in \mathbb{N}$ , existe un  $k \in \mathbb{N}$  tal que

$$\lambda_j - 1 = 1 + \mu_k.$$

Luego,  $\lambda_j \geq 2$  para todo  $j \in \mathbb{N}$ .

Ahora, sean  $(\psi_j)_{j \in \mathbb{N}}$ ,  $(\varphi_k)_{k \in \mathbb{N}}$  las familias autonormales de autofunciones asociadas, respectivamente, a los autovalores positivos y negativos del operador  $\sigma \cdot L$ . Entonces:

$$f = \sum_{j \in \mathbb{N}} \langle f, \psi_j \rangle \psi_j + \sum_{k \in \mathbb{N}} \langle f, \varphi_k \rangle \varphi_k, \quad (1.24)$$

y

$$(\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L) f = \sum_{j \in \mathbb{N}} (1 - \lambda_j) \langle f, \psi_j \rangle \psi_j + \sum_{k \in \mathbb{N}} (1 + \mu_k) \langle f, \varphi_k \rangle \varphi_k. \quad (1.25)$$

Haciendo las cuentas, obtenemos

$$\langle (\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L)^2 \psi_j, \psi_j \rangle - \langle \psi_j, \psi_j \rangle = (1 - \lambda_j)^2 - 1 \geq 0, \quad j \in \mathbb{N}.$$

$$\langle (\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L)^2 \varphi_k, \varphi_k \rangle - \langle \varphi_k, \varphi_k \rangle = (1 + \mu_k)^2 - 1 \geq 0, \quad k \in \mathbb{N}.$$

Así,  $(\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L)^2 - \mathbb{I}_2$  es un operador positivo tanto en su proyección positiva como negativa, como se quería probar.

■

**Observación 1** Denotamos por  $\psi_j$  y  $\varphi_k$  los autovalores negativos y positivos del operador  $\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L$ , respectivamente. De la ecuación (1.25), se sigue que

$$(\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L)f = \sum_{j \in \mathbb{N}} \lambda_j \langle f, \psi_j \rangle \psi_j + \sum_{k \in \mathbb{N}} \mu_k \langle f, \varphi_k \rangle \varphi_k = P^+ f - P^- f, \quad (1.26)$$

donde  $P^+$  y  $P^-$  denota la parte positiva y negativa del operador  $\mathbb{I}_2 + \sigma \cdot L$ , respectivamente. Sea  $l \in \mathbb{N}$ , de la ecuación 1.23, se sigue

$$\left( P^+ \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^+ \right) \varphi_l = \left( P^+ \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \right) (\lambda_l \varphi_l) = -P^+ P^- \left( \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \varphi_l \right) = 0. \quad (1.27)$$

Análogamente

$$\left( P^- \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^- \right) \psi_l = 0. \quad (1.28)$$

Por el ítem 6 del Lema 1.2.1,

$$P^+ \alpha \cdot \frac{x}{|x|} - P^- \alpha \cdot \frac{x}{|x|} = \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^+ - \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^-, \quad (1.29)$$

aplicando  $P^+$  y  $P^-$  tanto a la derecha como izquierda de la igualdad (1.29), y de las identidades (1.27) y (1.28), obtenemos

$$-P^+ \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^- = \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^- = P^+ \alpha \cdot \frac{x}{|x|}, \quad (1.30)$$

y

$$-P^- \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^+ = \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^+ = P^- \alpha \cdot \frac{x}{|x|}. \quad (1.31)$$

Desde que  $P^+$  es un operador proyección y de la igualdad (1.31), se obtiene

$$\int \beta \psi \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^+ \psi = \int \beta \psi \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^+ P^+ \psi = \int \beta \psi P^- \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^+ \psi = \int \beta P^- \psi \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^+ \psi,$$

ya que  $P^\pm, \beta, \alpha \cdot$  son operadores autoadjuntos, el primero conmuta con  $\beta$  y los dos primeros conmutan con  $\alpha \cdot \frac{x}{|x|}$ .

**Teorema 1.2.1 (Desigualdad de Hardy para la ecuación de Dirac)**

$$\int \frac{|\psi|^2}{|x|} dx \leq \int |(\alpha \cdot \nabla + im\beta + \epsilon \mathbb{I}_4) \psi|^2 |x| dx \quad , \quad m > 0, \epsilon \in \mathbb{R}.$$

**Demostración:** Parte principal de la demostración radica en estimar una cota para la cantidad

$$2\operatorname{Re} \int (\alpha \cdot \nabla + im\beta + \epsilon\mathbb{I}_4) \psi \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \overline{(P^+\psi - P^-\psi)}. \quad (1.32)$$

Por un lado, se cumple la igualdad

$$2i\operatorname{Im} \int \beta \psi \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \overline{(P^+\psi - P^-\psi)} = 0. \quad (1.33)$$

En efecto, usamos el hecho que  $\operatorname{Im} z = \frac{1}{2i}(z - \bar{z})$ . Entonces:

$$\begin{aligned} (1.33) &= \int \beta \psi \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \overline{(P^+\psi - P^-\psi)} - \int \bar{\beta} \bar{\psi} \alpha \cdot \frac{x}{|x|} (P^+\psi - P^-\psi) \\ &= \int \beta \psi \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \overline{P^+\psi} - \int \beta \psi \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \overline{P^-\psi} - \int \bar{\beta} \bar{\psi} \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^+\psi + \int \bar{\beta} \bar{\psi} \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^-\psi \\ &= \left( \int \beta \psi \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \overline{P^+\psi} + \int \bar{\beta} \bar{\psi} \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^-\psi \right) - \left( \int \beta \psi \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \overline{P^-\psi} + \int \bar{\beta} \bar{\psi} \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^+\psi \right) \\ &= \left( \int \beta \psi P^-\alpha \cdot \frac{x}{|x|} \overline{\psi} + \int \bar{\beta} \bar{\psi} \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^-\psi \right) - \left( \int \beta \psi P^+\alpha \cdot \frac{x}{|x|} \overline{\psi} + \int \bar{\beta} \bar{\psi} \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^+\psi \right) \\ &= \left( \int P^-\psi \bar{\beta} \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \overline{\psi} + \int \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \bar{\beta} \psi P^-\psi \right) - \left( \int P^+\psi \bar{\beta} \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \overline{\psi} + \int \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \bar{\beta} \psi P^+\psi \right) \\ &= \int (P^- - P^+) \psi \left( \bar{\beta} \alpha \cdot \frac{x}{|x|} + \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \bar{\beta} \right) \overline{\psi} = 0, \end{aligned}$$

ya que  $\alpha \cdot \frac{x}{|x|}$  anticonmuta con  $\beta$ .

De manera análoga, se cumple la igualdad

$$\operatorname{Re} \int \psi \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \overline{(P^+\psi - P^-\psi)} = 0. \quad (1.34)$$

Reemplazando las igualdades (1.33) y (1.34) en (1.32), se tiene

$$2\operatorname{Re} \int (\alpha \cdot \nabla + im\beta + \epsilon\mathbb{I}_4) \psi \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \overline{(P^+\psi - P^-\psi)} = 2\operatorname{Re} \int \alpha \cdot \nabla \psi \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \overline{(P^+\psi - P^-\psi)}. \quad (1.35)$$

Hacemos las cuentas para calcular una expresión reducida de (1.35). Por un lado, se tiene

$$\begin{aligned}
2\operatorname{Re} \int \alpha \cdot \nabla \psi \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \overline{P^+ \psi} &= \int \alpha \cdot \nabla \psi \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \overline{P^+ \psi} + \int \overline{\alpha \cdot \nabla \psi} \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^+ \psi \\
&= \int \alpha \cdot \nabla \psi \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \overline{P^+ P^+ \psi} + \int \overline{\alpha \cdot \nabla \psi} \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^+ P^+ \psi \\
&= \int \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \alpha \cdot \nabla P^+ \psi \overline{P^+ \psi} - \int \alpha \cdot \nabla \alpha \cdot \frac{x}{|x|} P^+ \psi \overline{P^+ \psi} \quad (1.36) \\
&= \int \left( \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \alpha \cdot \nabla - \alpha \cdot \nabla \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \right) P^+ \psi \overline{P^+ \psi} \\
&= -2 \int \frac{1}{|x|} (\mathbb{I}_4 + \alpha \cdot L) P^+ \psi \overline{P^+ \psi},
\end{aligned}$$

y de manera análoga, se tiene

$$2\operatorname{Re} \int \alpha \cdot \nabla \psi \alpha \cdot \frac{x}{|x|} \overline{P^- \psi} = -2 \int \frac{1}{|x|} (\mathbb{I}_4 + \alpha \cdot L) P^- \psi \overline{P^- \psi}. \quad (1.37)$$

Reemplazando (1.37) y (1.36) en (1.35), obtenemos

$$\begin{aligned}
|(1.32)| &= \left| -2 \int \frac{1}{|x|} (\mathbb{I}_4 + \alpha \cdot L) P^+ \psi \overline{P^+ \psi} + 2 \int \frac{1}{|x|} (\mathbb{I}_4 + \alpha \cdot L) P^- \psi \overline{P^- \psi} \right| \\
&\geq 2 \int \frac{1}{|x|} (|P^+ \psi|^2 + |P^- \psi|^2) \\
&= 2 \int \frac{1}{|x|} |\psi|^2. \quad (1.38)
\end{aligned}$$

Por otro lado, por Cauchy-Schwarz, se tiene

$$\begin{aligned}
|(1.32)| &= 2 \left| \operatorname{Re} \int |x|^{1/2} (\alpha \cdot \nabla + im\beta + \epsilon \mathbb{I}_4) \psi \frac{1}{|x|^{1/2}} \alpha \cdot \frac{x}{|x|} (P^+ \psi - P^- \psi) \right| \\
&\leq 2 \left| \int |x|^{1/2} (\alpha \cdot \nabla + im\beta + \epsilon \mathbb{I}_4) \psi \frac{1}{|x|^{1/2}} \alpha \cdot \frac{x}{|x|} (P^+ \psi - P^- \psi) \right| \\
&\leq 2 \left( \int |x| |(\alpha \cdot \nabla + im\beta + \epsilon \mathbb{I}_4) \psi|^2 \right)^{1/2} \left( \int \frac{1}{|x|} \left| \alpha \cdot \frac{x}{|x|} (P^+ \psi - P^- \psi) \right|^2 \right)^{1/2} \quad (1.39) \\
&= 2 \left( \int |x| |(\alpha \cdot \nabla + im\beta + \epsilon \mathbb{I}_4) \psi|^2 \right)^{1/2} \left( \int \frac{1}{|x|} (|P^+ \psi|^2 + |P^- \psi|^2) \right)^{1/2} \\
&= 2 \left( \int |x| |(\alpha \cdot \nabla + im\beta + \epsilon \mathbb{I}_4) \psi|^2 \right)^{1/2} \left( \int \frac{1}{|x|} |\psi|^2 \right)^{1/2}
\end{aligned}$$

Finalmente, de (1.38) y (1.39), se concluye la prueba. ■

### 1.3. Teorema Virial

Sea la ecuación de Schrödinger lineal

$$\partial_t \psi = i \Delta \psi \quad , \quad x \in \mathbb{R}^d, \quad t \in \mathbb{R}. \quad (1.40)$$

Haremos unas cuentas para estimar la cantidad  $\int |x|^2 |\psi(x, t)|^2 dx$ , la cual esta relacionada con la posición de la partícula en un tiempo  $t$ . Para esto, procedemos de manera formal. Consideramos dos funciones, una radial  $\phi(x) = \phi(|x|)$  y la otra  $h$ , definida por

$$h(t) = \int \phi(x) |\psi(x, t)|^2 dx, \quad (1.41)$$

donde  $\psi$  es solución de la ecuación (1.40). Denotamos  $\partial_t \psi = \psi_t$ , entonces

$$\frac{d}{dt} |\psi(x, t)|^2 = \psi_t \bar{\psi} + \psi \bar{\psi}_t = i (\Delta \psi \bar{\psi} - \psi \Delta \bar{\psi}) = i \operatorname{div} (\nabla \psi \bar{\psi} - \psi \nabla \bar{\psi}) = -2 \operatorname{div} \operatorname{Im} (\nabla \psi \bar{\psi}). \quad (1.42)$$

La primera derivada de la función  $h$  viene dada por

$$h'(t) = \int \phi(x) \frac{d}{dt} |\psi(x, t)|^2 dx = -2 \operatorname{Im} \int \phi \operatorname{div} (\nabla \psi \bar{\psi}) = 2 \operatorname{Im} \int \nabla \phi \nabla \psi \bar{\psi}. \quad (1.43)$$

La segunda derivada de la función  $h$  viene dada por

$$\begin{aligned} h''(t) &= 2 \operatorname{Im} \int \nabla \phi \frac{d}{dt} (\nabla \psi \bar{\psi}) \\ &= 2 \operatorname{Im} \int \nabla \phi (\nabla \psi_t \bar{\psi} + \nabla \psi \bar{\psi}_t) \\ &= 2 \operatorname{Im} \int \nabla \phi (\nabla (i \Delta \psi) \bar{\psi} + \nabla \psi (-i \Delta \bar{\psi})) \\ &= 2 \operatorname{Re} \int \nabla \phi (\nabla (\Delta \psi) \bar{\psi} - \nabla \psi (\Delta \bar{\psi})) \\ &= 2 \operatorname{Re} \int \Delta \psi \nabla (\nabla \phi \bar{\psi}) - \nabla \psi \Delta \bar{\psi} \nabla \phi \\ &= 2 \operatorname{Re} \int -(\Delta \psi \Delta \phi \bar{\psi} + \Delta \psi \nabla \phi \nabla \bar{\psi}) - \nabla \psi \Delta \bar{\psi} \nabla \phi \\ &= -2 \operatorname{Re} \int \Delta \psi \Delta \phi \bar{\psi} - 2 \operatorname{Re} \int \Delta \psi \nabla \phi \nabla \bar{\psi} - \nabla \psi \Delta \bar{\psi} \nabla \phi \\ &= -2 \operatorname{Re} \int \Delta \psi \Delta \phi \bar{\psi} - 2 \operatorname{Re} \int \nabla \phi (\Delta \psi \nabla \bar{\psi} + \Delta \bar{\psi} \nabla \psi) \\ &= -2 \operatorname{Re} \int \Delta \psi \Delta \phi \bar{\psi} - 4 \operatorname{Re} \int \nabla \phi \Delta \psi \nabla \bar{\psi} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -2\text{Re} \int \Delta\psi \Delta\phi \bar{\psi} - 4\text{Re} \int \nabla\phi \Delta\psi \nabla\bar{\psi} \\
&= -2\text{Re} \int \Delta\psi \Delta\phi \bar{\psi} + 2\nabla\phi \Delta\psi \nabla\bar{\psi} \\
&= -4\text{Re} \int \Delta\psi \left( \nabla\phi \nabla + \frac{1}{2}\Delta\phi \right) \bar{\psi} \\
&= -4\text{Re} \int \Delta\psi \bar{A}\bar{\psi} = 4\text{Re} \int \nabla\psi \nabla \bar{A}\bar{\psi},
\end{aligned}$$

donde  $A = \nabla\phi \nabla + \frac{1}{2}\Delta\phi$ . Por lo tanto, al ser  $A$  un operador antisimétrico, obtenemos

$$h''(t) = 4\text{Re} \int \nabla\psi \bar{A}\nabla\bar{\psi} + 4\text{Re} \int \nabla\psi (\overline{\nabla A - A\nabla})\bar{\psi} = 4\text{Re} \int \nabla\psi (\overline{\nabla A - A\nabla})\bar{\psi}. \quad (1.44)$$

Ahora calculamos el respectivo conmutador

$$\begin{aligned}
(\nabla A - A\nabla)\psi &= \nabla(A\psi) - A(\nabla\psi) \\
&= \nabla \left( \nabla\phi \nabla\psi + \frac{1}{2}(\Delta\phi)\psi \right) - \left( \nabla\phi \nabla(\nabla\psi) + \frac{1}{2}(\Delta\phi)\nabla\psi \right) \\
&= \Delta\phi \nabla\psi + \nabla\phi \Delta\psi + \frac{1}{2}(\nabla\Delta\phi\psi + \Delta\phi \nabla\psi) - \nabla\phi \Delta\psi - \frac{1}{2}\Delta\phi \nabla\psi \\
&= \left( \Delta\phi \nabla + \frac{1}{2}\nabla\Delta\phi \right) \psi.
\end{aligned} \quad (1.45)$$

Por otro lado, se verifica

$$\begin{aligned}
2\text{Re} \int \psi \nabla \Delta\phi \nabla \bar{\psi} &= \int \psi \nabla \Delta\phi \nabla \bar{\psi} + \int \bar{\psi} \nabla \Delta\phi \nabla \psi \\
&= \int \nabla \bar{\psi} (\nabla \Delta\phi \psi) + \int \nabla \psi (\nabla \Delta\phi \bar{\psi}) \\
&= - \left( \int \bar{\psi} (\Delta^2 \phi) \psi + \bar{\psi} \nabla \Delta\phi \nabla \psi + \psi (\Delta^2 \phi) \bar{\psi} + \psi \nabla \Delta\phi \nabla \bar{\psi} \right) \\
&= -2 \int \Delta^2 \phi |\psi|^2 - 2\text{Re} \int \psi \nabla \Delta\phi \nabla \bar{\psi}.
\end{aligned}$$

Entonces

$$2\text{Re} \int \psi \nabla \Delta\phi \nabla \bar{\psi} = - \int \Delta^2 \phi |\psi|^2. \quad (1.46)$$

Reemplazando (1.45) y (1.46) en la ecuación (1.44), obtenemos

$$\begin{aligned}
h''(t) &= 4\text{Re} \int \nabla\psi \overline{\left( \Delta\phi \nabla + \frac{1}{2}\nabla\Delta\phi \right) \psi} \\
&= 4\text{Re} \int \nabla\psi \Delta\phi \nabla \bar{\psi} + 2\text{Re} \int \nabla\psi \nabla \Delta\phi \bar{\psi}
\end{aligned}$$

$$= 4 \int \nabla \psi \Delta \phi \overline{\nabla \psi} - \int \Delta^2 \phi |\psi|^2.$$

Por lo tanto, hemos demostrado el siguiente lema.

**Lema 1.3.1** Sean  $\psi$  una solución de la ecuación (1.40),  $\phi$  una función radial y  $h$  definida por (1.41). Entonces

$$h''(t) = 4 \int \nabla \psi \Delta \phi \overline{\nabla \psi} - \int \Delta^2 \phi |\psi|^2.$$

Si  $\phi(x) = |x|^2$ . Se cumple que

$$\Delta \phi = 2\mathbb{I}_d, \quad \Delta^2 \phi = 0.$$

Por lo tanto, el siguiente corolario es consecuencia inmediata del Lema 1.3.1.

**Corolario 1.3.1** Si  $\phi(x) = |x|^2$ . Entonces

$$h''(t) = 8 \int |\nabla \psi(x, t)|^2 dx.$$

Si  $\psi$  es una solución de la ecuación (1.40), entonces la función  $\int |\psi(x, t)|^2 dx$  es constante. En efecto, de la ecuación (1.42) obtenemos

$$\frac{d}{dt} \int |\psi(x, t)|^2 dx = -2\text{Im} \int \text{div} (\nabla \psi \overline{\psi}) = -2\text{Im} \int \nabla \psi \nabla \overline{\psi} + \Delta \psi \overline{\psi} = 0.$$

Como  $\nabla \psi$  también es solución de (1.42), se cumple

$$\frac{d}{dt} \int |\nabla \psi(x, t)|^2 dx = 0. \quad (1.47)$$

**Teorema 1.3.1** Sea  $\psi$  una solución de la ecuación (1.40), con condición inicial  $\psi_0(x) = \psi(x, 0)$ . Entonces

$$h(t) = \int |x|^2 |\psi(x, t)|^2 dx$$

es una función convexa. Más aún, es una función polinómica de grado 2.

**Demostración:** Denotamos las constantes

$$a = \int |x|^2 |\psi_0(x)|^2 dx, \quad b = \int |\nabla \psi_0(x)|^2 dx. \quad (1.48)$$

Por el corolario 1.3.1 y de (1.47),  $h''(t) = 8b > 0$ . Por lo tanto,  $h$  es una función convexa. Más aún

$$h(t) = a + h'(0)t + 4bt^2.$$

■

**Lema 1.3.2** Sea  $\psi$  una solución de la ecuación (1.40), con condición inicial  $\psi_0$ . Entonces

- Si  $\nu \in \mathbb{R}^d$ , la función  $\psi_\nu(x, t) = e^{-it|\nu|^2 + i\nu \cdot x} \psi(x - 2t\nu, t)$  también es solución de (1.40), con condición inicial  $\psi_\nu(x, 0) = e^{-i\nu \cdot x} \psi_0(x)$ .
- Si  $x_0 \in \mathbb{R}^d$ , la función entonces  $\psi^{x_0}(x, t) = \psi(x - x_0, t)$  también es solución de la ecuación (1.40), con condición inicial  $\psi^{x_0}(x, 0) = \psi_0(x - x_0)$ .

**Observación 2 (Sobre  $h'(0)$ )** En la demostración del Teorema 1.3.1, se puede considerar  $h'(0) = 0$ . Esto se puede hacer observando que  $h(t)$  ha de tener un mínimo en un cierto punto  $t = t_0$ . Basta entonces hacer una traslación en el tiempo. Otra posibilidad es la siguiente. Obsérvese que si  $\psi(x, t)$  es una solución de la ecuación de Schrödinger

$$\partial_t \psi = i\Delta \psi, \quad (1.49)$$

con condición inicial  $\psi_0(x)$ , entonces  $\overline{\psi(x, -t)}$  también es solución de la ecuación de Schrödinger, con condición inicial  $\overline{\psi_0(x)}$ . Por lo tanto, las cantidades  $a$  y  $b$  definidas en la prueba del Teorema 1.3.1, son las mismas para ambas soluciones. Por lo tanto,

$$h(t) = \int \phi(x) |\psi(x, t)|^2 dx = \int \phi(x) \left| \overline{\psi(x, -t)} \right|^2 dx = \int \phi(x) |\psi(x, -t)|^2 dx = h(-t).$$

Entonces

$$a + h'(0)t + 4bt^2 = h(t) = h(-t) = a - h'(0)t + 4bt^2,$$

así,  $h'(0) = 0$  y  $h(t) = a + 4bt^2$ .

A continuación, hacemos una cuenta formal para derivar la desigualdad de Heisenberg-Pauli-Weyl. Para lo cual, procedemos tal como en la primera sección de este capítulo. En  $L^2(\mathbb{R}^d)$  consideramos los operadores  $S\psi = x\psi$  y  $A\psi = \nabla\psi$  y calculamos su respectivo conmutador

$$(SA - AS)\psi = S(A\psi) - A(S\psi) = S(\nabla\psi) - A(x\psi) = x\nabla\psi - \nabla(x\psi) = -d\psi.$$

Entonces

$$d \int |\psi|^2 = -\langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle \leq 2 \|S\psi\| \|A\psi\| = 2 \left( \int |x|^2 |\psi|^2 \right)^{1/2} \left( \int |\nabla\psi|^2 \right)^{1/2}. \quad (1.50)$$

La desigualdad (1.50) es llamada **desigualdad de Heisenberg-Pauli-Weyl**.

Sea una  $\psi$  solución de la ecuación de Schrödinger con condición inicial  $\psi_0(x)$  tal que  $\|\psi_0\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 = 2/d$ . De la definición de las constantes  $a$  y  $b$ , y la desigualdad (1.50) aplicada a  $\psi_0$ , se sigue que  $1 \leq ab$ . Entonces

$$h(t) = a + 4bt^2 \geq a + \frac{4}{a}t^2,$$

donde la igualdad ( $1 = ab$ ) se cumple si y solo si existe una función  $\varphi$  tal que  $(S + A)\varphi = 0$ . Tal función existe y se trata de la gaussiana  $\varphi(x) = Ke^{-|x|^2/2}$ , donde  $K$  es una constante tal que  $\|\varphi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 = 2/d$ .

**Lema 1.3.3** *Sea  $\psi$  una solución de la ecuación  $\partial_t \psi = (S + A)\psi$ , donde los operadores  $S$  y  $A$  son simétrico y antisimétrico, respectivamente. Si  $[S, A] = SA - AS \geq 0$ , entonces la función  $H(t) = \langle \psi, \psi \rangle$  es logarítmicamente convexa.*

**Demostración:** Calculamos la primera y segunda deriva de  $H$ .

$$\begin{aligned} H'(t) &= \langle \psi_t, \psi \rangle + \langle \psi, \psi_t \rangle = \langle (S + A)\psi, \psi \rangle + \langle \psi, (S + A)\psi \rangle = 2\langle S\psi, \psi \rangle. \\ H''(t) &= 2(\langle (S\psi)_t, \psi \rangle + \langle S\psi, \psi_t \rangle) \\ &= 2(\langle S\psi_t, \psi \rangle + \langle S\psi, \psi_t \rangle) \\ &= 2(\langle \psi_t, S\psi \rangle + \langle S\psi, \psi_t \rangle) \\ &= 2(\langle (S + A)\psi, S\psi \rangle + \langle S\psi, (S + A)\psi \rangle) \\ &= 4\langle S\psi, S\psi \rangle + 2\langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle. \end{aligned}$$

A continuación, calculamos la segunda derivada de  $\log H$ .

$$\begin{aligned} (\log H)'' &= \left( \frac{H'}{H} \right)' = \frac{H''H - (H')^2}{H^2} \\ &= \frac{4\langle S\psi, S\psi \rangle + 2\langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle \langle \psi, \psi \rangle - (2\langle S\psi, \psi \rangle)^2}{\langle \psi, \psi \rangle^2} \\ &= \frac{4\|S\psi\|^2 \|\psi\|^2 - 4\langle S\psi, \psi \rangle^2}{\|\psi\|^4} + \frac{2\langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle}{\|\psi\|^2} \\ &\geq \frac{2\langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle}{\|\psi\|^2} \geq 0. \end{aligned}$$

El resultado se sigue de esta desigualdad. ■

**Ejemplo 5** *En el espacio  $L^2(\mathbb{R})$ , consideramos  $S \equiv 0$  y  $A = i\partial_x$ . Es claro que los operadores  $S$  y  $A$  son simétrico y antisimétrico, respectivamente. Como  $SA - AS \equiv 0$ , por el lema 1.3.3, se cumple la desigualdad*

$$\int |\psi(x, t)|^2 dx \leq \left( \int |\psi(x, 0)|^2 dx \right)^{\frac{1-t}{2}} \left( \int |\psi(x, 1)|^2 dx \right)^{\frac{t}{2}}.$$

*En particular, si  $\psi(x, 1) = 0$  y  $\psi(x, 0) \in L^2(\mathbb{R})$ , la solución de la ecuación  $\partial_t \psi = i\partial_x \psi$  es idénticamente nula. Análogamente, se obtiene desigualdad para los pares  $S = \Delta, A \equiv 0$  y  $S = 0, A = i\Delta$ .*

**Teorema 1.3.2** Sea  $\psi$  una solución de la ecuación  $\partial_t \psi = i\Delta \psi$ . Sean  $\lambda > 0$  y la función  $H$  definida por

$$H(t) = \int e^{2\lambda|x|^2} |\psi(x, t)|^2 dx,$$

tal que  $H(0) + H(1) < \infty$ . Entonces  $\log H$  es una función convexa.

**Demostración:** Usamos el lema 1.3.3 para probar que la función  $\log H$  es convexa. Seguidamente, enunciaremos un lema previo para probar que  $H(t) < \infty$ .

Sea  $\phi(x)$  una función radial y  $H(t) = \langle e^{\lambda\phi}\psi, e^{\lambda\phi}\psi \rangle = \langle f, f \rangle$ , donde  $f = e^{\lambda\phi}\psi$ . Entonces:

$$\begin{aligned} \Delta \psi &= \Delta(e^{-\lambda\phi} f) = \operatorname{div} \nabla(e^{-\lambda\phi} f) = \operatorname{div}(-\lambda \nabla \phi e^{-\lambda\phi} f + e^{-\lambda\phi} \nabla f) \\ &= -\lambda(\Delta \phi e^{-\lambda\phi} f + \nabla \phi(-\lambda \nabla \phi e^{-\lambda\phi} f + e^{-\lambda\phi} \nabla f)) + (-\lambda \nabla \phi e^{-\lambda\phi} \nabla f + e^{-\lambda\phi} \Delta f) \\ &= -\lambda \Delta \phi e^{-\lambda\phi} f + \lambda^2 |\nabla \phi|^2 e^{-\lambda\phi} f - \lambda \nabla \phi e^{-\lambda\phi} \nabla f - \lambda \nabla \phi e^{-\lambda\phi} \nabla f + e^{-\lambda\phi} \Delta f \\ &= e^{-\lambda\phi}(-\lambda \Delta \phi f + \lambda^2 |\nabla \phi|^2 f - 2\lambda \nabla \phi \nabla f + \Delta f) \\ &= e^{-\lambda\phi}((\lambda^2 |\nabla \phi|^2 + \Delta)f - (\lambda \Delta \phi + 2\lambda \nabla \phi \nabla)f). \end{aligned}$$

Entonces

$$\partial_t f = e^{\lambda\phi} \psi_t = ie^{\lambda\phi} \Delta \psi = i(\lambda^2 |\nabla \phi|^2 + \Delta)f - i(\lambda \Delta \phi + 2\lambda \nabla \phi \nabla)f = (S + A)f, \quad (1.51)$$

donde  $S = -i\lambda(\Delta \phi + 2\nabla \phi \nabla)$ ,  $A = i(\lambda^2 |\nabla \phi|^2 + \Delta)$ . Es claro que los operadores  $S$  y  $A$  son simétrico y antisimétrico, respectivamente. Ahora calculamos el conmutador  $[S, A]$ .

$$\begin{aligned} [S, A]f &= S(i\lambda^2 |\nabla \phi|^2 f + i\Delta f) - A(-i\lambda \Delta \phi f - 2i\lambda \nabla \phi \cdot \nabla f) \\ &= -i\lambda \Delta \phi (i\lambda^2 |\nabla \phi|^2 f + i\Delta f) - 2i\lambda \nabla \phi \cdot \nabla (i\lambda^2 |\nabla \phi|^2 f + i\Delta f) \\ &\quad - i\lambda^2 |\nabla \phi|^2 (-i\lambda \Delta \phi f - 2i\lambda \nabla \phi \cdot \nabla f) - i\Delta (-i\lambda \Delta \phi f - 2i\lambda \nabla \phi \cdot \nabla f) \\ &= \lambda^3 \Delta \phi |\nabla \phi|^2 f + \lambda \Delta \phi \Delta f - 2i\lambda \nabla \cdot (i\lambda^2 \nabla (|\nabla \phi|^2 f) + i\nabla(\Delta f)) \\ &\quad - \lambda^3 |\nabla \phi|^2 \Delta \phi f - 2\lambda^3 |\nabla \phi|^2 \nabla \phi \cdot \nabla f - \lambda \Delta(\Delta \phi f) - 2\lambda \Delta(\nabla \phi \cdot \nabla f) \\ &= \lambda^3 \Delta \phi |\nabla \phi|^2 f + \lambda \Delta \phi \Delta f + 2\lambda^3 \nabla \phi \cdot \nabla (|\nabla \phi|^2 f) + 2\lambda \nabla \phi \cdot \nabla(\Delta f) \\ &\quad - \lambda^3 |\nabla \phi|^2 \Delta \phi f - 2\lambda^3 |\nabla \phi|^2 \nabla \phi \cdot \nabla f - \lambda \Delta(\Delta \phi f) - 2\lambda \Delta(\nabla \phi \cdot \nabla f) \\ &= \lambda \Delta \phi \Delta f + 2\lambda^3 \nabla \phi \cdot \nabla (|\nabla \phi|^2 f) + 2\lambda^3 |\nabla \phi|^2 \nabla \phi \cdot \nabla f + 2\lambda \nabla \phi \cdot \nabla(\Delta f) \\ &\quad - 2\lambda^3 |\nabla \phi|^2 \nabla \phi \cdot \nabla f - \lambda \Delta(\Delta \phi f) - 2\lambda \Delta(\nabla \phi \cdot \nabla f) \\ &= 2\lambda^3 \nabla \phi \cdot \nabla (|\nabla \phi|^2 f) + 2\lambda \nabla \phi \cdot \nabla(\Delta f) - \lambda \Delta^2 \phi f - 2\lambda \nabla(\Delta \phi) \cdot \nabla f \\ &\quad - 2\lambda \Delta(\nabla \phi \cdot \nabla f) = I + II + III + IV + V \end{aligned} \quad (1.52)$$

A continuación calculamos uno a uno los términos

$$I = 2\lambda^3 \sum_j \partial_j \phi \partial_j (|\nabla \phi|^2) f = \sum_j \partial_j \phi \partial_j \left( \sum_k (\partial_k \phi)^2 \right) f = 4\lambda^3 \sum_{j,k} \partial_j \phi \partial_k \phi \partial_{kj} \phi f \quad (1.53)$$

$$II = 2\lambda \sum_j \partial_j \phi \partial_j \left( \sum_k \partial_{kk} f \right) = 2\lambda \sum_{j,k} \partial_j \phi \partial_{kkj} f \quad (1.54)$$

$$III = -\lambda \sum_{jj} \left( \sum_k \partial_{kk} \phi \right) f = -\lambda \sum_{j,k} \partial_{jjkk} \phi f \quad (1.55)$$

$$IV = -2\lambda \sum_j \partial_j (\Delta \phi) \partial f = -2\lambda \sum_j \partial_j \left( \sum_k \partial_{kk} \phi \right) \partial_j f = -2\lambda \sum_{jk} \partial_{jjkk} \phi \partial_j f \quad (1.56)$$

$$V = -2\lambda \sum_j \partial_{jj} \left( \sum_k \partial_k \phi \partial_k f \right) = -2\lambda \sum_{j,k} \partial_{kjj} \phi \partial_k f - 4\lambda \partial_{kj} \phi \partial_{kj} f - 2\lambda \partial_k \phi \partial_{kjj} f \quad (1.57)$$

Reemplazando las igualdades (1.53), (1.54), (1.55), (1.56) y (1.57) en (1.52), y reduciendo términos, se tiene

$$[S, A] f = (4\lambda^3 D^2 \phi \cdot \nabla \phi \nabla \phi - 4\lambda \nabla \cdot (D^2 \phi \nabla \cdot) + \lambda \Delta^2 \phi) f,$$

donde  $D^2 \phi$  denota la matriz de las segundas derivadas de  $\phi$ .

Para  $\phi(x) = |x|^2$ , se tiene las igualdades

$$\nabla \phi = 2x, \quad \Delta^2 \phi = 0, \quad D^2 \phi = 2\mathbb{I}_d.$$

Entonces

$$\langle (SA - AS)f, f \rangle = \int [S, A] f \bar{f} = \lambda \left( 32\lambda^2 \int |x|^2 |f|^2 + 8 \int |\nabla f|^2 \right) \geq 0.$$

Por el lema 1.3.3, la función  $\log H$  es convexa. De hecho, se puede refinar esta cota por un número estrictamente positivo. En efecto, por la desigualdad de Heisenberg-Pauli-Weyl, se tiene

$$\begin{aligned} \lambda d \int |f|^2 &\leq \left( 4\lambda^2 \int |x|^2 |f|^2 \right)^{1/2} \left( \int |\nabla f|^2 \right)^{1/2} \\ &\leq \frac{1}{2} \left( 4\lambda^2 \int |x|^2 |f|^2 \right) + \frac{1}{2} \left( \int |\nabla f|^2 \right) \\ &= 2\lambda^2 \int |x|^2 |f|^2 + \frac{1}{2} \int |\nabla f|^2. \end{aligned}$$

Multiplicando a ambos miembros de la desigualdad por  $16\lambda$ , obtenemos

$$\langle (SA - AS)f, f \rangle \geq 16\lambda^2 d \int |f|^2 > 0.$$

**Lema 1.3.4** Si  $\psi$  es una solución de la ecuación  $\partial_t \psi = (S + A)\psi$ , donde los operadores  $S$  y  $A$  son simétrico y antisimétrico, respectivamente. Entonces

$$\int_0^1 \eta'(t) H'(t) dt = \eta' H|_0^1 - \int_0^1 \eta''(t) H(t) dt. \quad (1.58)$$

Además, si consideramos una perturbación del sistema inicial:  $\partial_t \psi = (S + A)\psi + V(x, t)\psi$ , entonces

$$\int_0^1 \eta'(t) H'(t) dt = 2\eta \langle S\psi, \psi \rangle|_0^1 - 2 \int_0^1 \eta \frac{d}{dt} \langle S\psi, \psi \rangle dt + 2\text{Re} \int_0^1 \eta'(t) \langle V(\cdot, t)\psi, \psi \rangle dt. \quad (1.59)$$

**Demostración:** Sabemos que  $(\eta' H)' = \eta'' H + \eta' H'$ , integrando de 0 a 1 y usando el Teorema Fundamental del Cálculo, se sigue la igualdad (1.58). A continuación mostramos la igualdad (1.59).

$$\begin{aligned} H'(t) &= \langle \psi_t, \psi \rangle + \langle \psi, \psi_t \rangle = \langle (S + A)\psi + V\psi, \psi \rangle + \langle \psi, (S + A)\psi + V\psi \rangle \\ &= \langle (S + A)\psi, \psi \rangle + \langle \psi, (S + A)\psi \rangle + \langle V\psi, \psi \rangle + \langle \psi, V\psi \rangle \\ &= 2\langle S\psi, \psi \rangle + 2\text{Re}\langle V\psi, \psi \rangle, \end{aligned}$$

por lo tanto:

$$\begin{aligned} \int_0^1 \eta' H' dt &= 2 \int_0^1 \eta' \langle S\psi, \psi \rangle + 2\text{Re} \int_0^1 \eta'(t) \langle V(\cdot, t)\psi, \psi \rangle dt \\ &= 2\eta \langle S\psi, \psi \rangle|_0^1 - 2 \int_0^1 \eta \frac{d}{dt} \langle S\psi, \psi \rangle + 2\text{Re} \int_0^1 \eta'(t) \langle V(\cdot, t)\psi, \psi \rangle dt. \end{aligned}$$

■

**Observación 3 (Recuperación de la función  $H$ )** Sea  $\psi$  una solución de la ecuación de Schrödinger con potencial,  $\partial_t \psi = (S + A)\psi + V(x, t)\psi$ . Entonces

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle S\psi, \psi \rangle &= \langle (S\psi)_t, \psi \rangle + \langle S\psi, \psi_t \rangle = \langle S\psi_t, \psi \rangle + \langle S\psi, \psi_t \rangle = \langle \psi_t, S\psi \rangle + \langle S\psi, \psi_t \rangle \\ &= \langle (S + A)\psi + V\psi, S\psi \rangle + \langle S\psi, (S + A)\psi + V\psi \rangle \\ &= \langle (S + A)\psi, S\psi \rangle + \langle V\psi, S\psi \rangle + \langle S\psi, (S + A)\psi \rangle + \langle S\psi, V\psi \rangle \\ &= 2\langle S\psi, S\psi \rangle + \langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle + 2\text{Re}\langle V\psi, S\psi \rangle. \end{aligned}$$

Luego, de las igualdades (1.58) y (1.59), obtenemos

$$\begin{aligned} \eta' H|_0^1 - \int_0^1 \eta''(t) H(t) dt &= 2\eta \langle S\psi, \psi \rangle|_0^1 - 2 \int_0^1 \eta \frac{d}{dt} \langle S\psi, \psi \rangle dt + 2\text{Re} \int_0^1 \eta'(t) \langle V(\cdot, t)\psi, \psi \rangle dt \\ &= 2\eta \langle S\psi, \psi \rangle|_0^1 + 2\text{Re} \int_0^1 \eta'(t) \langle V(\cdot, t)\psi, \psi \rangle dt \end{aligned}$$

$$- 2 \int_0^1 \eta [2\langle S\psi, S\psi \rangle + \langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle].$$

Imponiendo que  $\eta(0) = 0 = \eta(1)$  de manera que el término  $\eta\langle S\psi, \psi \rangle|_0^1$  se anula, entonces

$$\begin{aligned} & 4 \int_0^1 \eta \langle S\psi, S\psi \rangle + 2 \int_0^1 \eta \langle (SA - AS)\psi, \psi \rangle dt - \int_0^1 \eta''(t) H(t) dt \\ &= -\eta' H|_0^1 + 2\operatorname{Re} \int_0^1 \eta'(t) \langle V(\cdot, t)\psi, \psi \rangle dt - 2\operatorname{Re} \int_0^1 \eta \langle V\psi, S\psi \rangle dt. \end{aligned}$$

De esta igualdad, si consideramos funciones  $\eta$  con suficiente regularidad y, por ejemplo, si  $V \in L^\infty$ , se puede recuperar la función  $H$ .

## 1.4. Ecuación del calor vs Ecuación de Schrödinger

En esta sección las cuentas serán hechas de manera formal. En  $\mathbb{R}^d$ , es conocido que la solución fundamental de la ecuación del calor,  $\psi_t = \Delta\psi$ , viene dada por

$$\phi(x, t) = \frac{1}{t^{d/2}} e^{-\frac{|x|^2}{4t}} \quad (1.60)$$

Sea  $a > 0$  y hacemos el cambio  $t \mapsto t + ia$ . La función  $\phi_c(x, t) = \phi(x, t + ia)$  también es solución de la ecuación del calor y, por (1.60), se tiene

$$\phi_c(x, t) = \frac{1}{(t + ia)^{d/2}} e^{-\frac{|x|^2}{4(t + ia)}} = \frac{1}{(t + ia)^{d/2}} e^{-\frac{t|x|^2}{4(t^2 + a^2)}} e^{-\frac{ia|x|^2}{4(t^2 + a^2)}}.$$

Estudiemos la dinámica de  $\phi_c$  a medida que pasa el tiempo.

- Para  $t = 0$ , se tiene

$$\Re \phi_c(x, 0) = \Re \left( \frac{1}{(ia)^{d/2}} e^{-\frac{i}{4}|x|^2} \right) \sim \cos \left( \frac{|x|^2}{4} \right).$$

- Para  $t = na$ , con  $n \in \mathbb{N}$ , se tiene

$$\phi_c(x, na) = \frac{1}{(na + ia)^{d/2}} e^{-\frac{na|x|^2}{4(n^2a^2 + a^2)}} e^{-\frac{ia|x|^2}{4(n^2a^2 + a^2)}} \sim e^{-\frac{n|x|^2}{4a(n^2 + 1)}}$$

la cual es una función gaussiana centrada en 0 y de base  $(2a(n + \frac{1}{n}))^{1/2}$ . Intuitivamente esto refleja que para valores  $0 < a < 1$ , la solución es muy concentrada alrededor del origen; y para valores de  $a > 1$ , la solución se difunde alrededor del origen. De

hecho, podemos calcular explícitamente el valor crítico del tiempo en el cual cambia la dinámica. Basta con hallar el máximo de la función  $f(t) = -\frac{t}{4(t^2 + a^2)}$ ; para lo cual, calculamos la derivada de  $f$ .

$$f'(t) = -\frac{4(t^2 + a^2) - t(8t)}{(t^2 + a^2)^2} = \frac{4a^2 - 4t^2}{(t^2 + a^2)^2}.$$

Esta derivada se anula en  $t_0 = a$ . Esto corrobora lo que intuitivamente notamos. Es decir, desde el tiempo  $0 < t < a$ , la solución se está concentrando alrededor del origen y, en el tiempo  $t_0 = a$  alcanza su máxima concentración; para luego empezar a difundirse. Aún así, mantiene su forma de gaussiana.

Por otro lado, si hacemos el cambio  $t \mapsto it + a$ , la función  $\phi_s(x, t) = \phi(x, it + a)$  es una solución de la ecuación de Schrödinger  $\psi_t = i\Delta\psi$ . Entonces

$$\phi_s(x, t) = \frac{1}{(it + a)^{d/2}} e^{-\frac{|x|^2}{4(it + a)}} = \frac{1}{(it + a)^{d/2}} e^{-\frac{a|x|^2}{4(t^2 + a^2)}} e^{-\frac{it|x|^2}{4(t^2 + a^2)}}.$$

Veamos la dinámica de  $\phi_s$  a medida que pasa el tiempo.

- Para  $t = 0$ , se tiene

$$\phi_s(x, 0) = \frac{1}{a^{d/2}} e^{-\frac{|x|^2}{4a}},$$

la cual es una función gaussiana centrada en cero y con base  $(2a)^{1/2}$ .

- Para  $t = na$ , con  $n \in \mathbb{N}$ , se tiene

$$\phi_s(x, na) = \frac{1}{(na + ia)^{d/2}} e^{-\frac{a|x|^2}{4(n^2a^2 + a^2)}} e^{-\frac{it|x|^2}{4(n^2a^2 + a^2)}} \sim e^{-\frac{|x|^2}{4a(n^2 + 1)}},$$

la cual es una función gaussiana centrada en el origen y de base es  $(2a(n^2 + 1))^{1/2}$ . Notemos que esta cantidad crece más rápido que la base encontrada para la ecuación del calor, es decir a medida que pasa el tiempo, la solución de la ecuación de Schrödinger se disipa rápidamente, a pesar de que en el tiempo  $t = 0$ , se comportaba como una sinoidal. Esto es debido a que la función  $f(t) = -\frac{a}{4(t^2 + a^2)}$  alcanza su máximo en  $t_0 = 0$ .

# Capítulo 2

## Extensiones autoadjuntas del operador de Dirac I

El hecho de tener operadores auto-adjuntos es una información fundamental en la mecánica cuántica. Es por ello que en este capítulo se estudian diferentes potenciales para los que se puede construir una extensión auto-adjunta del operador y se detalla en cada caso el dominio de la extensión. En particular, se estudian los potenciales electromágenticos con singularidad de tipo Coulomb. Comenzaremos definiendo conceptos básicos que se utilizarán una y otra vez a lo largo de este tema, tales como, operador simétrico o extensión auto-adjunta y mencionaremos algunos de los resultados ya existentes. En el segundo apartado enunciaremos el teorema principal, que es un teorema de existencia y unicidad de una ecuación en derivadas parciales. Este teorema servirá para demostrar el resultado sobre extensiones auto-adjuntas que se enuncia en el tercer apartado. Finalizaremos dando algunos ejemplos de potenciales que se consideran en los teoremas principales. Para un mayor detalle de los resultados mostrados en este capítulo consultar el artículo ([5]), y las referencias contenidas en el mismo.

### 2.1. Operador de Dirac y extensiones auto-adjuntas

Consideramos el operador de tipo Coulomb con potenciales  $H_0 = -i\alpha \cdot \nabla + m\beta$  y  $H = H_0 + \mathbb{V}$ , donde  $H_0$  es el operador de Dirac libre. La ecuación de Dirac con potencial matricial  $\mathbb{V}$  viene dada por

$$i\partial_t \psi(x, t) = H\psi(x, t).$$

En este capítulo estudiamos bajo qué condiciones sobre el potencial  $\mathbb{V}$ , el operador  $H$  es autoadjunto. Propiamente hablando, se mostrará que si  $\mathbb{V}$  es simétrico y  $\sup_{x \in \mathbb{R}^3/\{0\}} |x| \|\mathbb{V}\| < 1$ , entonces  $H$  es autoadjunto en un subespacio de  $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$ . En este capítulo consideramos

la norma  $\|\mathbb{V}\| = \sup_{\|\psi\|=1} \langle \mathbb{V}\psi, \mathbb{V}\psi \rangle^{1/2}$ .

Previamente, damos la definición de operadores simétricos, autoadjuntos y esencialmente autoadjuntos. Sea  $T : D(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  un operador densamente definido en un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$ . Definimos el conjunto

$$D(T^*) = \{\psi \in \mathcal{H} \mid \exists \psi^* \in \mathcal{H} \text{ tal que } \langle T\varphi, \psi \rangle_{\mathcal{H}} = \langle \varphi, \psi^* \rangle_{\mathcal{H}} \text{ para toda } \varphi \in D(T)\}.$$

Para cada  $\psi \in D(T)$ ,  $\psi^* \in \mathcal{H}$  es único. En efecto, si  $\langle T\varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, \psi_1^* \rangle$  y  $\langle T\varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, \psi_2^* \rangle$ , para toda  $\varphi \in D(T)$ . Entonces

$$\langle \varphi, \psi_1^* - \psi_2^* \rangle = 0 \quad , \quad \varphi \in D(T).$$

Desde que  $D(T)$  es un subespacio denso de  $\mathcal{H}$ , se sigue que  $\psi_1^* = \psi_2^*$ . Por lo tanto, la aplicación  $T^* : D(T^*) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  dada por  $T^*\psi = \psi^*$ , está bien definida.

**Definición 2.1.1** Sea  $T : D(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  un operador densamente definido en un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$ . El operador  $T^*$  se llama **adjunto** de  $T$ .

**Definición 2.1.2** Un operador  $T : D(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ , densamente definido en un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$ , se llama **simétrico** si  $T \subset T^*$ , es decir, si  $D(T) \subset D(T^*)$  y  $T\psi = T^*\psi$  para toda  $\psi \in D(T)$ .

**Definición 2.1.3** Un operador  $T$  es llamado **autoadjunto** si  $T = T^*$ , es decir, si  $T$  es simétrico y  $D(T) = D(T^*)$ .

**Teorema 2.1.1** Sea  $T$  un operador simétrico en un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$ . Las siguientes afirmaciones son equivalentes:

- a.  $T$  es autoadjunto.
- b.  $T$  es cerrado y  $\ker(T^* \pm i) = \{0\}$ .
- c.  $\text{Ran}(T \pm i) = \mathcal{H}$ .

**Definición 2.1.4** Un operador  $T : D(T) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ , densamente definido en un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$ , se llama **esencialmente autoadjunto** si  $\overline{T}$  es autoadjunto.

**Corolario 2.1.1** Sea  $T$  un operador simétrico en un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$ . Las siguientes afirmaciones son equivalentes:

- a.  $T$  es esencialmente autoadjunto.

b.  $\text{Ker}(T^* \pm i) = \{0\}.$

c.  $\overline{\text{Ran}(T \pm i)} = \mathcal{H}.$

A continuación un repaso breve de la literatura.

- El operador  $H_0 = -i\alpha \cdot \nabla + m\beta$  es autoadjunto en  $H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$ . Intuitivamente  $H_0$  describe los movimientos relativistas de partículas con spín 1/2 y sin interacción entre átomos o fuerzas externas. Este es un modelo idealizado, por lo cual, para hacerlo más realista, se adiciona un potencial  $\mathbb{V}$ .
- Kato '80. Si  $|V_{ij}| \leq \frac{a}{2} + b$  con  $a < 1$ ,  $b > 0$  y  $V_{ij}$  es el término  $ij$  de la matriz  $\mathbb{V}$ . Entonces  $H_0 + \mathbb{V}$  es esencialmente autoadjunto en  $C_c^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$ .
- Weidmann '71. Si  $\mathbb{V} = \frac{v}{|x|}\mathbb{I}_4$ . Entonces,  $H$  es esencialmente autoadjunto en  $C_c^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$  si y solo si  $|v| < \frac{\sqrt{3}}{2}$  y es autoadjunto en  $H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$ .
- Wüst '73. Si  $\mathbb{V} = \frac{v}{|x|}\mathbb{I}_4$ , con  $v < 1$ . Entonces  $H$  posee una única extensión autoadjunta de  $H$  tal que  $D(T) \subset D(r^{-1/2})$ .
- Schimcke '76. Para el caso anterior, probó que existe una única extensión autoadjunta de  $H$  en  $C_c^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$  con  $D(H) \subset H^{1/2}$ .
- Esteban y Loss, 2007. Si  $H = H_0 + \frac{v}{|x|}\mathbb{I}_4$  tal que  $v \leq 1$  y  $\lambda \in (-1, 1)$ . Si

$$\int \frac{1}{|x| |\phi|^2} \leq \int \frac{|\sigma \cdot \nabla \phi|^2}{1 - \frac{v}{|x|} + \lambda} + (1 + \lambda) \int |\phi|^2, \quad \frac{\nabla v}{(v - \gamma)^2} \in L_{loc}^2,$$

entonces,  $H$  es esencialmente autoadjunto en cierto dominio  $\mathcal{D}$ .

- Si  $V = \begin{pmatrix} w_1 & 0 \\ 0 & w_2 \end{pmatrix}$ , donde  $w_1$  es una función real o una medida,  $w_2 \geq 0$  y  $m > 0$ . Si  $w_i \leq V_i \leq \frac{1}{|x|}$  para  $i = 1, 2$  y

$$\int V_1 |\phi|^2 \leq \int \frac{|\sigma \cdot \nabla \phi|^2}{m + V_2 - \lambda} + (m + \lambda) \int |\phi|^2,$$

entonces,  $H$  con dominio  $\mathcal{D} \subset (L^2 \times H^1(\mathbb{R}^3))^2$  es esencialmente autoadjunto.

**Observación 4** *Los resultados anteriores no comprenden el caso de los potenciales electro-magnéticos, como por ejemplo:*

$$\mathbb{V} = \begin{pmatrix} \frac{v}{|x|} & \sigma \cdot A \\ \sigma \cdot A & \frac{v}{|x|} \end{pmatrix}$$

donde  $A$  es un vector con singularidad de tipo Coulomb. Es por ello que para este tipo de potenciales hay que desarrollar un método diferente. En este caso, se hace uso de extensiones autoadjuntas. En este caso hay que desarrollar un método diferente, ya que, por el momento no se sabe probar el análogo a la desigualdad anterior para el caso magnético.

## 2.2. Existencia y unicidad de solución de una EDP

En el Teorema 1.2.1 del capítulo 1, se probó la desigualdad de Hardy para la ecuación de Dirac:

$$\int \frac{|\psi|^2}{|x|} dx \leq \int |(i\alpha \cdot \nabla + m\beta \pm \epsilon i\mathbb{I}_4) \psi|^2 |x| dx \quad , \quad m > 0, \epsilon \in \mathbb{R}. \quad (2.1)$$

Además, se puede probar la desigualdad del siguiente lema, la cual utilizaremos en la prueba del teorema principal de este capítulo, Teorema 2.2.1.

**Lema 2.2.1** *Se cumple la desigualdad:*

$$\frac{8}{9} \int |x| |\alpha \cdot \nabla \psi|^2 \leq \int |(\alpha \cdot \nabla + im\beta \pm \epsilon i\mathbb{I}_4) \psi|^2 |x| dx \quad , \quad m > 0, \epsilon \in \mathbb{R}.$$

Dichas desigualdades son necesarias para la demostración del teorema que sigue. En las sucesivas integrales, cuando no se indique el dominio de integración, se está integrando en todo  $\mathbb{R}^3$ .

**Teorema 2.2.1** *Sean  $f \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$  y  $\mathbb{V}$  una matriz simétrica tal que  $\sup_{x \in \mathbb{R}^3/\{0\}} |x| \|\mathbb{V}\| = c < 1$ . Entonces:*

- *Existe una única  $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$  tal que*

$$\int \psi \overline{(H+i)\varphi} = \int f \overline{\varphi} \quad , \quad \text{para toda } \varphi \in L^2, (H+i)\varphi \in L^2. \quad (2.2)$$

- *Existe una única  $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$  tal que*

$$\int \psi \overline{(H-i)\varphi} = \int f \overline{\varphi} \quad , \quad \text{para toda } \varphi \in L^2, (H-i)\varphi \in L^2. \quad (2.3)$$

*Además:*

$$\|\psi\|_2 \leq \|f\|_2. \quad (2.4)$$

$$\int \frac{1}{|x|} |\psi|^2 \leq C \|f\|_2^2 \quad , \quad C > 0. \quad (2.5)$$

$$\int_{|x|<1} |x| |\alpha \cdot \nabla \psi|^2 \leq C \|f\|_2^2, \quad C > 0. \quad (2.6)$$

$$\|\psi\|_{H^{1/2}} \leq C \|f\|_2, \quad C > 0. \quad (2.7)$$

Sean  $f_1, f_2 \in L^2$  y sus correspondientes  $\psi_1, \psi_2 \in H^{1/2}$ . Entonces

$$\int (H \pm i) \psi_1 \overline{\psi_2} = \int \psi_1 \overline{(H \mp i) \psi_2}. \quad (2.8)$$

**Demostración:** Dividimos la prueba en varios pasos. Primeramente, probamos que  $H$  es simétrico en un subespacio denso de  $L^2$ . Luego, usando argumentos de densidad probamos el resultado.

1. Sea  $\tilde{D} = \{\psi \in L^2(1 + |x|) \mid H\psi \in L^2(1 + |x|)\}$ . Entonces, para todo  $f \in L^2(1 + |x|)$ , existe un único  $\psi \in \tilde{D}$  tal que  $(H + i)\psi = f$ .

En efecto,

$$\begin{aligned} & (H + i)\psi = f \\ \iff & (i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i + \mathbb{V})\psi = f \\ \iff & \frac{|x|^{1/2}}{|x|^{1/2}} (i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i) \frac{|x|^{1/2}}{|x|^{1/2}} \psi + \frac{1}{|x|^{1/2}} \frac{1}{|x|^{1/2}} |x| \mathbb{V} \psi = f \\ \iff & |x|^{1/2} (i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i) |x|^{1/2} \frac{1}{|x|^{1/2}} \psi + |x| \mathbb{V} \frac{1}{|x|^{1/2}} \psi = |x|^{1/2} f \\ & \left( \tilde{K} = |x|^{1/2} (i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i) |x|^{1/2}, w = \frac{1}{|x|^{1/2}} \psi, F = |x|^{1/2} f \right) \\ \iff & \tilde{K}w + |x| \mathbb{V}w = F \\ & \left( K = \tilde{K}^{-1} = |x|^{-1/2} (i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i)^{-1} |x|^{-1/2} \right) \\ \iff & (\mathbb{I} + K |x| \mathbb{V}) w = \mathbb{I}_4 w + K |x| \mathbb{V}w = KF \\ \iff & \|K |x| \mathbb{V}\| < 1 \\ \iff & \sup_{F \neq 0} \frac{|K |x| \mathbb{V}F|}{|F|} < 1 \\ \iff & \|K |x| \mathbb{V}F\| \leq v \|F\|, \quad v < 1 \\ \iff & \int |K |x| \mathbb{V}F|^2 \leq v \int |F|^2 \\ \iff & \int \left| |x|^{-1/2} (i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i)^{-1} |x|^{-1/2} |x| \mathbb{V} \left( |x|^{1/2} f \right) \right|^2 \leq v \int |x| |f|^2 \end{aligned}$$

$$\Longleftarrow \int \frac{1}{|x|} |(i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i)^{-1} |x| \mathbb{V} f|^2 \leq v \int |x| |f|^2, \quad 0 < v < 1.$$

Entonces, bastará probar la última desigualdad. De la ecuación (2.1), se tiene

$$\int \frac{1}{|x|} |(i\alpha \cdot \nabla + m\beta \pm \epsilon i \mathbb{I}_4)^{-1} f|^2 dx \leq \int |x| |f|^2 dx, \quad f \in L^2(\mathbb{R}^3),$$

en particular, para  $|x| \mathbb{V} f$  y por la hipótesis sobre  $\mathbb{V}$ , obtenemos

$$\int \frac{1}{|x|} |(i\alpha \cdot \nabla + m\beta \pm \epsilon i \mathbb{I}_4)^{-1} |x| \mathbb{V} f|^2 dx \leq \int |x| ||x| \mathbb{V} f|^2 dx \leq \int |x| |f|^2 dx.$$

Por lo cual, el operador  $\mathbb{I}_d + K |x| \mathbb{V}$  es invertible. Así, la ecuación  $(\mathbb{I} + K |x| \mathbb{V}) w = KF$  posee una única solución, y viene dada por la serie de Neuman

$$w = (\mathbb{I} + K |x| \mathbb{V})^{-1} (KF) = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j (K |x| \mathbb{V})^j (KF),$$

entonces

$$\psi = |x|^{1/2} w = |x|^{1/2} (\mathbb{I} + K |x| \mathbb{V})^{-1} (KF) = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j |x|^{1/2} (K |x| \mathbb{V})^j (KF) \quad (2.9)$$

Desde que

$$K |x| = |x|^{-1/2} (i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i)^{-1} |x|^{-1/2} |x| = |x|^{-1/2} (i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i)^{-1} |x|^{1/2},$$

y

$$KF = |x|^{-1/2} (i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i)^{-1} |x|^{-1/2} |x|^{1/2} f = |x|^{-1/2} (i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i)^{-1} f.$$

Reemplazando estas igualdades en la ecuación (2.9), obtenemos

$$\psi = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j ((i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i)^{-1} \mathbb{V})^j (i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i)^{-1} f. \quad (2.10)$$

Una vez probado la existencia y unicidad de  $\psi$ , aún queda por probar que pertenece a  $\tilde{D}$ . Para esto, veamos algunas consideraciones:

- (a) Sean  $\psi = (i\alpha \cdot \nabla - m\beta \pm \epsilon i \mathbb{I}_4)^{-1} f$  y  $\epsilon = 1$ . Reemplazando en la desigualdad (2.1), obtenemos

$$\int \frac{1}{|x|} |(i\alpha \cdot \nabla - m\beta \pm i)^{-1} f|^2 \leq \int |x| |f|^2. \quad (2.11)$$

Por hipótesis,  $f \in L^2(1 + |x|) \subset L^2(|x|)$ . Entonces, la desigualdad (2.11) implica que  $(i\alpha \cdot \nabla - m\beta \pm i)^{-1} f \in L^2(1/|x|)$ .

(b) Sea  $g \in L^2(1/|x|)$ , entonces  $g/|x| \in L^2(|x|)$ . Por la hipótesis sobre la matriz  $\mathbb{V}$  se sigue que

$$|\mathbb{V}g| < \frac{1}{|x|} |g|, \quad (2.12)$$

Lo cual implica que  $\mathbb{V}g \in L^2(|x|)$ .

Por lo tanto, de las consideraciones (a) y (b), la serie  $\psi$  definida por (2.9), es convergente. Mas aún,  $\psi \in L^2(1/|x|)$  y  $\mathbb{V}\psi \in L^2(|x|)$ . Como  $(i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i)\psi + \mathbb{V}\psi = f$ , entonces  $(i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i)\psi \in L^2(|x|)$ .

Por el Lema 2.2.1,  $i\alpha \cdot \nabla \psi \in L^2(|x|)$ , entonces  $(-m\beta - i)\psi \in L^2(|x|)$ . Así  $\psi \in L^2(|x|)$  y de la consideración (a),  $\psi \in L^2(1/|x|)$ . Entonces:

$$\int |\psi|^2 = \int \frac{1}{|x|^{1/2}} \psi |x|^{1/2} \bar{\psi} \leq \left( \int \frac{1}{|x|} |\psi|^2 \right)^{1/2} \left( \int |x| |\bar{\psi}|^2 \right)^{1/2} < \infty.$$

Por lo tanto,  $f \in L^2(1 + |x|)$  y desde que  $H\psi = f - i\psi$ ,  $H\psi \in L^2(1 + |x|)$ . Esto prueba que para todo  $f \in L^2(1 + |x|)$ , existe un único  $\psi \in \tilde{D}$  tal que  $(H \pm i)\psi = f$ .

De manera análoga, se prueba el caso  $(H - i)\psi = f$ .

2. Como segundo paso en la prueba, mostramos que  $H$  es simétrico en  $\tilde{D}$ .

En efecto, sean  $\psi_1, \psi_2 \in L^2(1 + |x|)$ . Por el paso 1, existen  $f_1, f_2 \in \tilde{D}$  tal que

$$(H + i)\psi_1 = f_1, \quad (H - i)\psi_2 = f_2$$

Mas aún, de (2.10), se tiene las igualdades

$$\psi_1 = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j ((i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i)^{-1} \mathbb{V})^j (i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i)^{-1} f_1. \quad (2.13)$$

$$\psi_2 = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j ((i\alpha \cdot \nabla - m\beta + i)^{-1} \mathbb{V})^j (i\alpha \cdot \nabla - m\beta + i)^{-1} f_2. \quad (2.14)$$

Hacemos un breve paréntesis para hacer unas cuentas que usamos mas adelante.

**Observación 5** *Teniendo en cuenta que  $(\sigma \cdot \nabla)^2 = \Delta$  y que  $\alpha \cdot$  anticonmuta con  $\beta$ , se tiene*

$$(i\alpha \cdot \nabla - m\beta + i)(i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i) = (i\alpha \cdot \nabla - m\beta)^2 - i^2 = \Delta + m^2 + 1.$$

Entonces

$$(i\alpha \cdot \nabla - m\beta \pm i)^{-1} = \frac{1}{\Delta + m^2 + 1}(i\alpha \cdot \nabla - m\beta \mp i) \quad (2.15)$$

y

$$(i\alpha \cdot \nabla - m\beta \pm i)^* = (i\alpha \cdot \nabla)^* - (m\beta)^* \pm (i\mathbb{I}_d)^* = i\alpha \cdot \nabla - m\beta \mp i \quad (2.16)$$

$$((i\alpha \cdot \nabla - m\beta \pm i)^{-1})^* = ((i\alpha \cdot \nabla - m\beta \pm i)^*)^{-1} = (i\alpha \cdot \nabla - m\beta \mp i)^{-1} \quad (2.17)$$

Retomando a la prueba del paso 2, tenemos que

$$\langle H\psi_1, \psi_2 \rangle = \langle (H + i)\psi_1, \psi_2 \rangle - i\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \langle f_1, \psi_2 \rangle - i\langle \psi_1, \psi_2 \rangle$$

De (2.14)

$$\begin{aligned} &= \langle f_1, \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j ((i\alpha \cdot \nabla - m\beta + i)^{-1} \mathbb{V})^j (i\alpha \cdot \nabla - m\beta + i)^{-1} f_2 \rangle - i\langle \psi_1, \psi_2 \rangle \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \langle f_1, (-1)^j ((i\alpha \cdot \nabla - m\beta + i)^{-1} \mathbb{V})^j (i\alpha \cdot \nabla - m\beta + i)^{-1} f_2 \rangle - i\langle \psi_1, \psi_2 \rangle \end{aligned}$$

De (2.13) y (2.17)

$$\begin{aligned} &= \sum_{j=0}^{\infty} \langle (-1)^j ((i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i)^{-1} \mathbb{V})^j (i\alpha \cdot \nabla - m\beta - i)^{-1} f_1, f_2 \rangle - i\langle \psi_1, \psi_2 \rangle \\ &= \langle \psi_1, f_2 \rangle - i\langle \psi_1, \psi_2 \rangle \\ &= \langle \psi_1, (H - i)\psi_2 \rangle + \langle \psi_1, i\psi_2 \rangle \\ &= \langle \psi_1, H\psi_2 \rangle. \end{aligned}$$

Por lo tanto,  $H$  es simétrico en  $\tilde{D}$ .

3. Para todo  $f \in L^2(1 + |x|)$ , se cumple  $\|\psi\|_2 \leq \|f\|_2$ .

En efecto, por el paso 1, sabemos que para todo  $f \in L^2(1 + |x|)$ , existe un único  $\psi \in \tilde{D}$  tal que  $(H + i)\psi = f$ . Entonces

$$\|f\|_{L^2} \|\psi\|_{L^2} \geq \operatorname{Im} \langle f, \psi \rangle = \operatorname{Im} \langle (H + i)\psi, \psi \rangle = \operatorname{Im} \langle H\psi, \psi \rangle + \operatorname{Im} (i\langle \psi, \psi \rangle) = \|\psi\|_{L^2}^2,$$

de lo cual se obtiene la desigualdad, ya que  $\operatorname{Im} \langle H\psi, \psi \rangle = 0$ , porque los autovalores de un operador autoadjunto son reales.

4. En este paso, mostramos la existencia de la función  $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$  tal que cumple la igualdad (2.3) (la igualdad (2.2) es análoga).

En efecto, el espacio  $L^2(1 + |x|)$  es denso en  $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$ . Así, para cada  $f \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$ , existe una sucesión  $(f_n)_{n \in \mathbb{N}} \in L^2(1 + |x|)$  tal que  $\lim_{n \rightarrow \infty} f_n = f$  en  $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$ . Por el paso 1, para cada  $n \in \mathbb{N}$ , existe  $\psi_n \in \tilde{D}$  tal que  $(H + i)\psi_n = f_n$ . Por el paso 3, se cumple la desigualdad

$$\|\psi_m - \psi_n\|_{L^2} \leq \|f_m - f_n\|_{L^2} \quad , \quad \text{para todo } m, n \in \mathbb{N}. \quad (2.18)$$

Al ser  $(f_n)$  una sucesión convergente en  $L^2$ , en particular es una sucesión de Cauchy. La desigualdad (2.18), implica que  $(\psi_n)$  es una sucesión de Cauchy en  $L^2$ . Por lo tanto, existe  $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$  tal que  $\lim_{n \rightarrow \infty} \psi_n = \psi$  en  $L^2$ .

Por otro lado, de la igualdad  $H\psi_n = f_n - i\psi_n$ , se sigue que la sucesión  $(H\psi_n)$  también es una sucesión de Cauchy en  $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$ . Por lo tanto, existe  $\phi \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$  tal que  $\lim_{n \rightarrow \infty} H\psi_n = \phi$  en  $L^2$ .

El operador  $H$  involucra el operador  $i\alpha \cdot \nabla$ , el cual es una matriz cuyos componentes involucran derivadas parciales. Entonces,  $\lim_{n \rightarrow \infty} H\psi_n = H\psi$  en  $L^2$  y  $H\psi = \phi$  en el sentido de las distribuciones, es decir

$$\begin{aligned} \langle (H + i)\psi_n, \varphi \rangle &= \langle f_n, \varphi \rangle \quad \text{para todo } n \in \mathbb{N}, \varphi \in \tilde{D}, \\ \langle H\psi_n, \varphi \rangle + i\langle \psi_n, \varphi \rangle &= \langle f_n, \varphi \rangle \\ \langle \psi_n, H\varphi \rangle + \langle \psi_n, -i\varphi \rangle &= \langle f_n, \varphi \rangle \\ \langle \psi_n, (H - i)\varphi \rangle &= \langle f_n, \varphi \rangle \\ \int \psi_n \overline{(H - i)\varphi} &= \int f_n \overline{\varphi}. \end{aligned}$$

Tomamos  $n \rightarrow \infty$ , entonces

$$\int \psi \overline{(H - i)\varphi} = \int f \overline{\varphi} \quad , \quad \text{para todo } \varphi \in \tilde{D}. \quad (2.19)$$

Como el conjunto de las funciones en el espacio de Schwartz  $\mathcal{S}$  es denso en  $L^2$ , y  $\mathcal{S} \subset \tilde{D}$ , se sigue que  $\tilde{D}$  también es denso en  $L^2$ . Por lo tanto, por argumentos de densidad, la igualdad (2.19) se cumple para funciones  $\varphi \in L^2$ , es decir

$$\int \psi \overline{(H - i)\varphi} = \int f \overline{\varphi} \quad , \quad \text{para todo } \varphi \in L^2, (H - i)\varphi \in L^2.$$

5. La función  $\psi$  del paso 4, es única.

En efecto, sean  $f \in L^2$  y  $\psi_1, \psi_2$  tal que se cumple la igualdad del paso 4. Por el paso 3, y siguiendo la demostración del paso 4, se tiene la desigualdad

$$\|\psi_m - \psi_n\|_2 \leq \|f_m - f_n\|_2, \quad \text{para todo } m, n \in \mathbb{N},$$

tomando  $m, n \rightarrow \infty$ , entonces  $\|\psi_1 - \psi_2\|_2 = 0$ . Por lo tanto, la unicidad está probada.

Hasta el momento, hemos probado las igualdades (2.2), (2.3) y la desigualdad (2.4).

6. En este paso, probamos la desigualdad (2.5). Definimos una función suave  $\eta$  de forma que

$$\eta(x) = \begin{cases} 1, & \text{si } |x| \leq 1, \\ 0, & \text{si } |x| > 2. \end{cases}, \quad \eta(x) \in (0, 1].$$

Definimos  $\tilde{f} = (H + i)(\eta\psi)$ . Entonces

$$\begin{aligned} \tilde{f} &= (-i\alpha \cdot \nabla + m\beta - \mathbb{V} + i)(\eta\psi) = (-i\alpha \cdot \nabla)(\eta\psi) + m\beta(\eta\psi) - \mathbb{V}(\eta\psi) + i\eta\psi \\ &= (-i\alpha) \cdot (\nabla\eta\psi + \eta\nabla\psi) + m\eta\beta\psi - \eta\mathbb{V}\psi + i\eta\psi \\ &= -i\alpha \cdot \nabla\eta - i\eta\alpha \cdot \nabla\psi + m\eta\beta\psi - \eta\mathbb{V}\psi + i\eta\psi \\ &= (-i\alpha \cdot \nabla\eta)\psi + \eta(-i\alpha \cdot \nabla + m\beta - \mathbb{V} + i)\psi = (-i\alpha \cdot \nabla\eta)\psi + \eta(H + i)\psi. \end{aligned} \quad (2.20)$$

El primer término pertenece a  $L^2(1 + |x|)$  porque  $f = (H + i)\psi \in L^2$  y por lo tanto  $\eta(H + i)\psi$  también. Respecto al segundo término,  $f \in L^2$ , luego, su correspondiente  $\psi$  también pertenece a  $L^2$ . Por lo tanto,  $(-i\alpha \cdot \nabla\eta)\psi \in L^2$  y como tiene soporte compacto  $(-i\alpha \cdot \nabla\eta)\psi \in L^2(1 + |x|)$ . Luego, se concluye que  $\tilde{f} \in L^2(1 + |x|)$ .

Por otro lado, de la desigualdad (2.1), se tiene

$$\int \frac{1}{|x|} |\eta\psi|^2 \leq \int |(H + i)\psi|^2 |x| = \int |x| |\tilde{f}|^2 < \infty, \quad (2.21)$$

entonces  $\eta\psi \in L^2(1/|x|)$ . Así

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{|x|} |\psi|^2 &= \int_{|x| \leq 1} \frac{1}{|x|} |\psi|^2 + \int_{|x| > 1} \frac{1}{|x|} |\psi|^2 \\ &= \int_{|x| \leq 1} \frac{1}{|x|} |\eta\psi|^2 + \int_{|x| > 1} \frac{1}{|x|} |\psi|^2 \\ &\leq \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{|x|} |\eta\psi|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 \leq \int_{\mathbb{R}^3} |x| |\tilde{f}|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} |f|^2. \end{aligned}$$

De(2.20):

$$\begin{aligned}
&= \int_{\mathbb{R}^3} |x| |(-i\alpha \cdot \nabla \eta)\psi + \eta f|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} |f|^2 \\
&\leq \int_{\mathbb{R}^3} |x| |(-i\alpha \cdot \nabla \eta)\psi|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} |x| |\eta f|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} |f|^2 \\
&= \int_{|x| \leq 1} |x| |(-i\alpha \cdot \nabla \eta)\psi|^2 + \int_{|x| \leq 1} |x| |\eta f|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} |f|^2 \\
&\leq \int_{|x| \leq 1} |(-i\alpha \cdot \nabla \eta)\psi|^2 + \int_{|x| \leq 1} |x| |\eta f|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} |f|^2 \\
&\leq C_1 \int_{|x| \leq 1} |\psi|^2 + C_2 \int_{|x| \leq 1} |f|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} |f|^2 \\
&\leq C_1 \int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 + C_2 \int_{\mathbb{R}^3} |f|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} |f|^2 \leq C \int_{\mathbb{R}^3} |f|^2,
\end{aligned}$$

donde  $C = C_1 + C_2 + 1$ .

7. En este paso, probamos la desigualdad (2.6).

$$\begin{aligned}
\int_{|x| < 1} |x| |i\alpha \cdot \nabla \psi|^2 &= \int_{|x| < 1} |x| |(i\alpha \cdot \nabla - m\beta + \mathbb{V} + i)\psi + (m\beta - \mathbb{V} - i)\psi|^2 \\
&\leq \int_{|x| < 1} |x| |(i\alpha \cdot \nabla - m\beta + \mathbb{V} + i)\psi|^2 \\
&\quad + \int_{|x| < 1} |x| |(m\beta - \mathbb{V} - i)\psi|^2 \\
&= \int_{|x| < 1} |x| |(H + i)\psi|^2 + \int_{|x| < 1} |x| |(m\beta - \mathbb{V} - i)\psi|^2 \\
&= \int_{|x| < 1} |x| |f|^2 + \int_{|x| < 1} |x| |m\beta\psi|^2 \\
&\quad + \int_{|x| < 1} |x| |\mathbb{V}\psi|^2 + \int_{|x| < 1} |x| |i\psi|^2 \\
&= \int_{|x| < 1} |f|^2 + m^2 \int_{|x| < 1} |\psi|^2 + \int_{|x| < 1} |\psi|^2 + \int_{|x| < 1} |\psi|^2 \\
&= \int_{\mathbb{R}^3} |f|^2 + m^2 \int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 \\
&\leq C \int_{\mathbb{R}^3} |f|^2,
\end{aligned}$$

donde  $C = 3 + m^2$ .

8. En este paso, probamos la desigualdad (2.7). Tomando transformada da Fourier, es fácil ver que

$$\int_{\mathbb{R}^3} \psi \sqrt{-\Delta} \psi = \int_{\mathbb{R}^3} i\alpha \cdot \nabla \psi \sqrt{-\Delta} (i\alpha \cdot \nabla)^{-1} \psi = \int_{\mathbb{R}^3} i\alpha \cdot \nabla \psi \bar{\phi},$$

donde  $\phi = \sqrt{-\Delta}(i\alpha \cdot \nabla)^{-1}\psi$ . Entonces

$$\begin{aligned}
 \left| \int_{\mathbb{R}^3} i\alpha \cdot \nabla \psi \bar{\phi} \right| &= \left| \int_{\mathbb{R}^3} (i\alpha \cdot \nabla + \mathbb{V})\psi \bar{\phi} - \int_{\mathbb{R}^3} \mathbb{V}\psi \bar{\phi} \right| \\
 &\leq \left| \int_{\mathbb{R}^3} (i\alpha \cdot \nabla + \mathbb{V})\psi \bar{\phi} \right| + \left| \int_{\mathbb{R}^3} \mathbb{V}\psi \bar{\phi} \right| \\
 &\leq \left( \int_{\mathbb{R}^3} |(i\alpha \cdot \nabla + \mathbb{V})\psi|^2 \right)^{1/2} \left( \int_{\mathbb{R}^3} |\phi|^2 \right)^{1/2} \\
 &\quad + \left( \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{|x|} |\psi|^2 \right)^{1/2} \left( \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{|x|} |\phi|^2 \right)^{1/2} \\
 &= I \cdot II + III \cdot IV.
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

A continuación, estimamos las cantidades  $I, II, III$  y  $IV$ .

$$\begin{aligned}
 I^2 &= \int |(i\alpha \cdot \nabla + \mathbb{V} - m\beta + i)\psi + (m\beta - i)\psi|^2 \\
 &\leq C \int |f|^2 + C(m^2 \|\beta\|^2 + 1) \int |\psi|^2 \leq C(m^2 \|\beta\|^2 + 2) \int |f|^2.
 \end{aligned} \tag{2.23}$$

$$\begin{aligned}
 II^2 &= \int \left| \sqrt{-\Delta}(i\alpha \cdot \nabla)^{-1}\psi \right|^2 = \int \left| \mathcal{F} \left( \sqrt{-\Delta}(i\alpha \cdot \nabla)^{-1}\psi \right) \right|^2 \\
 &= \int |\mathcal{F}(\psi)|^2 = \int |\psi|^2 \leq \int |f|^2.
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

De la desigualdad (2.5), se tiene

$$III^2 = \int \frac{1}{|x|} |\psi|^2 \leq C \int |f|^2, \tag{2.25}$$

$$IV^2 = \int \frac{1}{|x|} |\phi|^2 \leq C \int \frac{1}{|x|} |\psi|^2 \leq C \int |f|^2. \tag{2.26}$$

Reemplazando las desigualdades (2.23), (2.24), (2.25) y (2.26), en (2.22), se obtiene la desigualdad (2.7).

9. En este paso, probamos la igualdad (2.8).

Sean  $f_1, f_2 \in L^2$ . Entonces, existen sucesiones  $(f_{1_n}), (f_{2_n}) \in L^2(1 + |x|)$  tal que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_{1_n} = f_1, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} f_{2_n} = f_2, \quad \text{en } L^2.$$

Además, para cada  $n \in \mathbb{N}$ , existen  $\psi_{1_n}, \psi_{2_n} \in \tilde{D}$  tal que

$$(H + i)\psi_{1_n} = f_{1_n}, \quad (H - i)\psi_{2_n} = f_{2_n}.$$

Por la desigualdad (2.4) y el paso 8, existen  $\psi_1, \psi_2 \in H^{1/2}$  tal que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \psi_{1_n} = \psi_1, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \psi_{2_n} = \psi_2,$$

y por el paso 2, se cumple la igualdad

$$\int (H + i)\psi_{1_n} \overline{\psi_{2_n}} = \int \psi_{1_n} \overline{(H - i)\psi_{2_n}}, \quad \text{para todo } n \in \mathbb{N}.$$

Tomando  $n \rightarrow \infty$ , obtenemos lo que queríamos probar

$$\int (H + i)\psi_1 \overline{\psi_2} = \int \psi_1 \overline{(H - i)\psi_2}.$$

■

## 2.3. Extensiones auto-adjuntas del operador de Dirac con potenciales de tipo Coulomb

Una vez demostrado el Teorema 2.2.1 la prueba del siguiente teorema resulta inmediata. Notar que los puntos (2.5) y (2.7) sirven para probar que el dominio de la extensión pertenece a  $D(H) \subset H^{1/2} \cap D(r^{-1/2})$ . En la prueba del Teorema 2.3.1 se utiliza el criterio básico del auto-adjunto enunciado anteriormente.

**Teorema 2.3.1** *Sea  $\mathbb{V}$  un potencial matricial simétrico tal que  $\sup_{x \in \mathbb{R}^3/\{0\}} |x| \|\mathbb{V}\| < 1$ . Entonces,  $H = -i\alpha \cdot \nabla + m\beta - \mathbb{V}$  es un operador autoadjunto en*

$$D(H) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4) \mid H\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)\}.$$

Más aún,

$$D(H) \subset H^{1/2} \cap D(r^{-1/2}),$$

donde,

$$D(r^{-1/2}) = \left\{ \psi \in L^2 \mid \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{|x|} |\psi|^2 < \infty \right\}.$$

**Demostración:** Por el Teorema 2.2.1, para cada  $f \in L^2$ , existe  $\psi \in L^2$  tal que  $(H \pm i)\psi = f$ . Por lo tanto  $H\psi \in L^2$ .

Ahora veamos que  $H$  es simétrico en  $D(H)$ . Sean  $\psi_1, \psi_2 \in D(H)$ , asociados a las funciones  $f_1, f_2 \in L^2$ , tal que

$$(H + i)\psi_1 = f_1, \quad (H - i)\psi_2 = f_2, \quad \text{en } L^2.$$

Entonces, usando la igualdad (2.8) del Teorema 2.2.1, se tiene

$$\begin{aligned}
\langle H\psi_1, \psi_2 \rangle &= \langle (H + i)\psi_1, \psi_2 \rangle - \langle i\psi_1, \psi_2 \rangle \\
&= \langle \psi_1, (H - i)\psi_2 \rangle - \langle i\psi_1, \psi_2 \rangle \\
&= \langle \psi_1, H\psi_2 \rangle + \langle i\psi_1, \psi_2 \rangle - \langle i\psi_1, \psi_2 \rangle \\
&= \langle \psi_1, H\psi_2 \rangle.
\end{aligned}$$

Por lo tanto,  $H$  es un operador simétrico en  $D(H)$ .

Por otro lado, vimos que los elementos  $\psi, H\psi \in L^2$ , luego  $\psi \in D(H)$ . Además, se tiene la igualdad  $(H + i)\psi = f \in L^2$ . Por la desigualdad (2.4),  $\int \frac{1}{|x|} |\psi|^2 \leq C \int |f|^2$ , entonces  $\psi \in D(r^{-1/2})$ ; y por la desigualdad (2.7),  $\|\psi\|_{H^{1/2}} \leq C \|f\|_2$ , entonces  $\psi \in H^{1/2}$ . ■

## 2.4. Ejemplos

A continuación se detallan varios ejemplos que se consideran en los dos teoremas principales de este capítulo.

**Ejemplo 6** Sean la matriz simétrica  $\mathbb{V} = \frac{v}{|x|} \mathbb{I}_4$ , con  $v < 1$ , y  $H = -i\alpha \cdot \nabla + m\beta - \mathbb{V}$ . Es claro que  $\mathbb{V}$  cumple las condiciones del Teorema 2.3.1.

Con este ejemplo se recuperan los resultados de Nenciu y Wüst, con la ventaja de que en este caso se da el dominio de la extensión de forma explícita.

**Ejemplo 7 (Potencial Electromagnético)** Sea  $A : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$  un potencial magnético. Denotamos por  $\nabla_A = \nabla - iA$  y consideramos el operador  $H$  definido por

$$H = -i\alpha \cdot \nabla_A + m\beta - \frac{v}{|x|} \mathbb{I}_4 = -i\alpha \cdot \nabla + m\beta - \left( \frac{v}{|x|} \mathbb{I}_4 + \alpha \cdot A \right) = -i\alpha \cdot \nabla + m\beta - \mathbb{V},$$

donde  $\mathbb{V} = \frac{v}{|x|} \mathbb{I}_4 + \alpha \cdot A$ . En este caso, veamos que  $\sup_{x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}} |x| \|\mathbb{V}\| < 1$  se cumple si  $\sup_{x \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}} (v + |x| |A|) < 1$ . Denotamos por  $\phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}$  un elemento de  $\mathbb{C}^2$ , con norma

$|\phi|^2 = |\phi_1|^2 + |\phi_2|^2$ . Análogamente, si  $\psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^4$ , su respectiva norma es  $|\psi|^2 = |\phi|^2 + |\chi|^2$ .

La matriz  $\mathbb{V}$  se define

$$\mathbb{V}\psi = \left( \frac{v}{|x|} \mathbb{I}_4 + \alpha \cdot A \right) \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{v}{|x|} & \sigma \cdot A \\ \sigma \cdot A & \frac{v}{|x|} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{v}{|x|} \phi + \sigma \cdot A \chi \\ \sigma \cdot A \phi + \frac{v}{|x|} \chi \end{pmatrix} = \frac{1}{|x|} \begin{pmatrix} v \phi + |x| \sigma \cdot A \chi \\ |x| \sigma \cdot A \phi + v \chi \end{pmatrix}.$$

Entonces,

$$\begin{aligned} |x|^2 |\nabla \psi|^2 &= \left| \begin{pmatrix} v \phi + |x| \sigma \cdot A \chi \\ |x| \sigma \cdot A \phi + v \chi \end{pmatrix} \right|^2 = |v \phi + |x| \sigma \cdot A \chi|^2 + ||x| \sigma \cdot A \phi + v \chi|^2 \\ &= v^2 |\phi|^2 + |x|^2 |A|^2 \left| \sigma \cdot \frac{A}{|A|} \chi \right|^2 + 2 \operatorname{Re} \langle v \phi, |x| |A| \sigma \cdot \frac{A}{|A|} \chi \rangle \\ &\quad + |x|^2 |A|^2 \left| \sigma \cdot \frac{A}{|A|} \phi \right|^2 + v^2 |\chi|^2 + 2 \operatorname{Re} \langle |x| |A| \sigma \cdot \frac{A}{|A|} \phi, v \chi \rangle \\ &= v^2 |\phi|^2 + |x|^2 |A|^2 |\chi|^2 + 2v |x| |A| \operatorname{Re} \langle \phi, \sigma \cdot \frac{A}{|A|} \chi \rangle \\ &\quad + |x|^2 |A|^2 |\phi|^2 + v^2 |\chi|^2 + 2v |x| |A| \operatorname{Re} \langle \sigma \cdot \frac{A}{|A|} \phi, \chi \rangle \\ &= v^2 |\psi|^2 + |x|^2 |A|^2 |\psi|^2 + 2v |x| |A| \operatorname{Re} \left( \langle \phi, \sigma \cdot \frac{A}{|A|} \chi \rangle + \langle \sigma \cdot \frac{A}{|A|} \phi, \chi \rangle \right) \\ &\leq v^2 |\psi|^2 + |x|^2 |A|^2 |\psi|^2 + 2v |x| |A| \left( \left| \phi \right| \left| \sigma \cdot \frac{A}{|A|} \chi \right| + \left| \sigma \cdot \frac{A}{|A|} \phi \right| |\chi| \right) \\ &= v^2 |\psi|^2 + |x|^2 |A|^2 |\psi|^2 + 2v |x| |A| (|\phi| |\chi| + |\phi| |\chi|) \\ &\leq v^2 |\psi|^2 + |x|^2 |A|^2 |\psi|^2 + 2v |x| |A| (|\phi|^2 + |\chi|^2) \\ &= v^2 |\psi|^2 + |x|^2 |A|^2 |\psi|^2 + 2v |x| |A| |\psi|^2 = (v + |x| |A|)^2 |\psi|^2. \end{aligned}$$

Entonces

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^3 / \{0\}} |x| \|\nabla \psi\| = \sup_{x \in \mathbb{R}^3 / \{0\}, \psi \neq 0} \frac{|x| |\nabla \psi|}{|\psi|} \leq \sup_{x \in \mathbb{R}^3 / \{0\}} (v + |x| |A|) < 1.$$



# Capítulo 3

## Extensiones autoadjuntas del operador de Dirac II

En este capítulo se asume que el lector está familiarizado con los operadores no acotados en espacios de Hilbert y la ecuación de Dirac, además de tener nociones básicas sobre teoría geométrica de la medida. Para estos temas, ver [25], [29] y [23], por ejemplo. Para más detalles sobre los resultados mostrados, consultar [6] y las referencias contenidas en el mismo.

### 3.1. Escenario y objetivo

Sea  $\nu$  una medida positiva de Borel en  $\mathbb{R}^3$ . Algunas consideraciones:

- Sea  $L^2(\nu)^4$ , el espacio definido por:

$$L^2(\nu)^4 = \left\{ f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}^4 \mid f \text{ es } \nu\text{-medible, } \|f\|_{L^2(\nu)^4}^2 = \int |f|^2 d\nu < +\infty \right\},$$

con producto interno  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2(\nu)^4}$  estándar en  $L^2(\nu)^4$ .

- Sea  $D = C_c^\infty(\mathbb{R}^3)^4$  el espacio de las funciones de  $\mathbb{R}^3$  con valores en  $\mathbb{C}^4$ ,  $C^\infty$  y soporte compacto.
- Denotamos por  $D^*$  el espacio de distribuciones con respecto a  $D$  (espacio test).
- Denotamos por  $\mu$  la medida de Lebesgue en  $\mathbb{R}^3$ .

Sea  $H : D^* \rightarrow D^*$ , el operador de Dirac definido por  $H = -i\alpha \cdot \nabla + m\beta$ . Durante todo el capítulo asumimos que  $m > 0$ . El **propósito de este capítulo** es hallar un subespacio  $E \subset L^2(\nu)^4 \subset D^*$  y, para alguna medida de Borel  $\nu$  singular a  $\mu$ ,  $V : E \rightarrow L^2(\nu)^4$  tal que

$(H + V)|_E$  es un operador autoadjunto con respecto a  $L^2(\nu)^4$ . Esto es debido a que una de las hipótesis clásicas para resolver la ecuación

$$\frac{d}{dt}\psi(x, t) = i(H + V)\psi(x, t),$$

es que  $H + V$  sea un operador autoadjunto.

**Ejemplo 8** Las medidas  $\nu$  que tenemos en mente serán, por ejemplo, la medida de superficie de:

- $\mathbb{R}^2 \times \{0\} \subset \mathbb{R}^3$ .
- $\mathbb{S}^2$ .
- La gráfica de una función lipschitziana de  $\mathbb{R}^2$  en  $\mathbb{R}$ .

**Observación 6 (Sobre operadores simétricos)** Sea  $T : D(T) \subset E \rightarrow E$  un operador no actodado y densamente definido en un espacio de Hilbert  $E$ . El adjunto del operador  $T$ , denotado por  $T^*$ , está definido en  $D(T^*) \subset E$  a  $E$ , donde

$$D(T^*) = \{y \in E \mid \exists z \in E \text{ tal que } \langle Tx, y \rangle_E = \langle x, z \rangle_E \text{ para todo } x \in D(T)\}$$

El elemento  $z \in E$  es único ya que  $D(T)$  es denso en  $E$ . Así, para  $y \in D(T^*)$ , denotamos  $T^*y = z$ .

**Definición 3.1.1** Un operador  $T$  es llamado **simétrico** si  $\langle Tx, y \rangle_E = \langle x, Ty \rangle_E$  para todo  $x \in D(T)$ .

**Definición 3.1.2** Un operador  $T$  es llamado **autoadjunto** si  $D(T) = D(T^*)$  y  $T = T^*$  en  $D(T)$ .

Equivalentemente, un operador  $T$  es autoadjunto si es simétrico y  $D(T^*) \subset D(T)$ .

## 3.2. Solución Fundamental de $H$

**Definición 3.2.1** Una función  $g$  es llamada **solución fundamental** de un operador diferencial  $D$ , si  $g * Df = f$  para todo  $f \in C_c^\infty$ . Es decir,  $Dg = \delta_0$  en el sentido de las distribuciones.

**Lema 3.2.1** La función

$$\phi_m(x) = \frac{e^{-m|x|}}{4\pi|x|} \left( m\beta + (1 + m|x|)i\alpha \cdot \frac{x}{|x|^2} \right),$$

es una solución fundamental de  $H$ . Es decir,  $H\phi_m = \delta_0 \mathbb{I}_4$ .

**Demostración:** Es sabido que la función

$$\psi_m(x) = \frac{e^{-m|x|}}{4\pi|x|},$$

es solución fundamental del operador diferencial  $-\Delta + m^2$ . Por otro lado, por las cuentas hechas en el primer capítulo, se cumple que

$$H^2 = (-i\alpha \cdot \nabla + m\beta)^2 = (-\Delta + m^2)\mathbb{I}_4. \quad (3.1)$$

Definimos  $\phi_m(x) = H(\psi_m(x)\mathbb{I}_4)$ . Entonces:

$$H(\phi_m) = H^2(\psi_m(x)\mathbb{I}_4) = ((-\Delta + m^2)\psi_m(x))\mathbb{I}_4 = \delta_0\mathbb{I}_4.$$

Por lo tanto,  $\phi_m$  es una solución fundamental de  $H$ .

A continuación calculamos explícitamente  $\phi_m$ . Se cumple la igualdad:

$$\begin{aligned} \nabla\psi_m(x) &= \frac{1}{4\pi}\nabla(e^{-m|x|}|x|^{-1}) = \frac{1}{4\pi}\left(-m\frac{x}{|x|}e^{-m|x|}|x|^{-1} - e^{-m|x|}|x|^{-2}\frac{x}{|x|}\right) \\ &= \frac{e^{-m|x|}}{4\pi|x|}(-mx|x|^{-1} - x|x|^{-2}). \end{aligned}$$

Entonces:

$$\begin{aligned} \phi_m(x) &= H(\psi_m\mathbb{I}_4) = -i\alpha \cdot \nabla(\psi_m\mathbb{I}_4) + m\beta(\psi_m\mathbb{I}_4) \\ &= -i\alpha \cdot \left(\frac{e^{-m|x|}}{4\pi|x|}(-mx|x|^{-1} - x|x|^{-2})\right) + m\beta\left(\frac{e^{-m|x|}}{4\pi|x|}\right) \\ &= \frac{e^{-m|x|}}{4\pi|x|}\left(i\alpha \cdot m\frac{x}{|x|} + i\alpha \cdot \frac{x}{|x|^2} + m\beta\right) \\ &= \frac{e^{-m|x|}}{4\pi|x|}\left(m\beta + (1 + m|x|)i\alpha \cdot \frac{x}{|x|^2}\right), \end{aligned}$$

lo cual concluye la prueba. ■

**Lema 3.2.2** *La función  $\phi_m$  cumple las siguientes propiedades:*

1.  $(\phi_m)_{i,j} \in C^\infty(\mathbb{R}^3 - \{0\})$ , para todo  $1 \leq i, j \leq 4$ .
2.  $\phi_m(x - y) = \overline{\phi_m^t(y - x)}$ , para todo  $x \neq y$ .
3.  $\sup_{i,j} |(\phi_m)_{i,j}(x)| = \mathcal{O}(|x|^{-2})$ , cuando  $|x| \rightarrow 0$ .
4.  $\sup_{i,j} |(\phi_m)_{i,j}(x)| = \mathcal{O}(e^{-m|x|})$ , cuando  $|x| \rightarrow \infty$ .
5.  $\sup_{i,j} \sup_{\xi \in \mathbb{R}^3} (1 + |\xi|^2)^{\frac{1}{2}} |\mathcal{F}((\phi_m)_{i,j})(\xi)| < +\infty$ .

**Demostración:** Se deja al lector. ■

### 3.3. El corazón del asunto

Sea  $\sigma$  una medida de Hausdorff 2-dimensional (medida de superficie) restringida a la frontera de un dominio lipschitziano (dominio cuya frontera se puede cubrir con una cantidad finita de gráficas de funciones lipschitzianas). Asumimos que  $\sigma$  es homogénea de grado dos, es decir, existe una constante  $c > 0$  tal que:

$$\frac{r^2}{c} \leq \sigma(B(x, r)) \leq cr^2, \text{ para todo } x \in \text{supp}(\sigma) \text{ y } 0 < r < 1.$$

Por ejemplo, la esfera, elipse y parábola cumplen esta propiedad.

Definimos el conjunto

$$\mathbb{X} = \{G\mu + g\sigma \mid G \in L^2(\mu)^4, g \in L^2(\sigma)^4\} \subset D^*,$$

con producto interno y norma:

$$\langle F\mu + f\sigma, G\mu + g\sigma \rangle_{\mathbb{X}} = \int F\bar{G}d\mu + \int f\bar{g}d\sigma,$$

$$\|G\mu + g\sigma\|_{\mathbb{X}}^2 = \|G\|_{L^2(\mu)^4}^2 + \|g\|_{L^2(\sigma)^4}^2.$$

**Lema 3.3.1** *Existe un  $b > 0$  tal que*

$$\|\phi_m * g\sigma\|_{L^2(\mu)^4} \leq b \|g\|_{L^2(\sigma)^4}^2, \text{ para toda } g \in L^2(\sigma)^4,$$

donde  $(\phi_m * g\sigma)(x) = \int \phi_m(x - y)g(y)d\sigma(y)$ .

**Demostración:** Sea  $K(x) = \sup_{1 \leq i, j \leq 4} |(\phi_m)_{i,j}(x)|$ . Entonces, usando Cauchy-Schwarz,

$$\begin{aligned} |(\phi_m * g\sigma)(x)|^2 &= \left| \int \phi_m(x - y)g(y)d\sigma(y) \right|^2 \leq b \left( \int K(x - y) |g(y)| d\sigma(y) \right)^2 \\ &\leq b \int K(x - y)^{\frac{3}{4}} d\sigma(y) \int K(x - z)^{\frac{5}{4}} |g(z)|^2 d\sigma(z) \end{aligned} \quad (3.2)$$

A continuación probamos que  $\int K(x - y)^{\frac{3}{4}} d\sigma(y) < +\infty$ . En efecto:

$$\begin{aligned} \int K(x - y)^{\frac{3}{4}} d\sigma(y) &= \int_{B(x,1)} K(x - y)^{\frac{3}{4}} d\sigma(y) + \int_{B(x,R) \setminus B(x,1)} K(x - y)^{\frac{3}{4}} d\sigma(y) \\ &\quad + \int_{B(x,R)^c} K(x - y)^{\frac{3}{4}} d\sigma(y) \\ &= I + II + III, \end{aligned} \quad (3.3)$$

donde  $R > 0$  es suficientemente grande. La descomposición de la integral en estos sumandos es debido a que usaremos las propiedades 3 y 4 del lema 3.2.2. Claramente  $II$  es finito. Veamos las cuentas para  $I$  y  $III$ , donde usaremos el crecimiento 2-dimensional de  $\sigma$ .

$$\begin{aligned}
|I| &= \sum_{j=0}^{\infty} \int_{B(x, 2^{-j}) \setminus B(x, 2^{-j-1})} K(x-y)^{\frac{3}{4}} d\sigma(y) \leq b \sum_{j=0}^{\infty} (2^{-j-1})^{-\frac{3}{2}} \sigma(B(x, 2^{-j})) \\
&\leq b \sum_{j=0}^{\infty} (2^{-j-1})^{-\frac{3}{2}} (c2^{-2j}) = bc \sum_{j=0}^{\infty} 2^{-\frac{1}{2}j} < +\infty. \\
|III| &= \sum_{j=0}^{\infty} \int_{B(x, R2^{j+1}) \setminus B(x, R2^j)} K(x-y)^{\frac{3}{4}} d\sigma(y) \leq b \sum_{j=0}^{\infty} e^{-\frac{3}{4}mR2^j} \sigma(B(x, R2^{j+1})) \\
&\leq bc \sum_{j=0}^{\infty} e^{-\frac{3}{4}mR2^j} 2^{2(j+1)} R^2 < +\infty.
\end{aligned} \tag{3.4}$$

Las constantes las denotamos con  $C$ , independientemente del valor que tengan en cada situación en particular. Por lo tanto, usando (3.2), (3.3) y (3.4),

$$|(\phi_m * g\sigma)(x)|^2 \leq C \int K(x-z)^{\frac{5}{4}} |g(z)|^2 d\sigma(z). \tag{3.5}$$

Integrando en  $\mathbb{R}^3$ , obtenemos

$$\int |(\phi_m * g\sigma)(x)|^2 d\mu(x) \leq C \iint K(x-z)^{\frac{5}{4}} |g(z)|^2 d\sigma(z) d\mu(x). \tag{3.6}$$

De forma similar a como hemos visto que (3.3) es finito, se comprueba que la integral  $\int K(x-z)^{5/4} d\mu(x)$  es finita, usando que  $\mu$  es 3-dimensional. El lema se obtiene aplicando Fubini en (3.6). ■

**Lema 3.3.2** *Existe  $b > 0$  tal que*

$$\|\phi_m * G\mu\|_{L^2(\mu)^4} \leq \|\phi_m * G\mu\|_{W^{1,2}(\mu)^4} \leq b \|G\|_{L^2(\mu)^4}.$$

**Demostración:** Por la propiedad 5 del lema 3.2.2 y el Teorema de Plancherel, se tiene

$$\begin{aligned}
\|\phi_m * G\mu\|_{W^{1,2}(\mu)^4}^2 &= \int (1 + |\xi|^2) |\mathcal{F}(\phi_m * G\mu)(\xi)|^2 d\mu(\xi) \\
&= \int (1 + |\xi|^2) |\mathcal{F}(\phi_m)(\xi)|^2 |\mathcal{F}(G)(\xi)|^2 d\mu(\xi) \\
&\leq C \int |\mathcal{F}(G)(\xi)|^2 d\mu(\xi) = C \|G\|_{L^2(\mu)^4}^2
\end{aligned}$$

■

**Corolario 3.3.1** *El operador  $\Phi : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{X}$  definido por*

$$\Phi(G\mu + g\sigma) = (\phi_m * G\mu + \phi_m * g\sigma) \mu$$

*es acotado.*

**Observación 7 (Operador Traza)** *Para  $f \in D$  y  $\Sigma$  una superficie regular en  $\mathbb{R}^3$ , definimos  $Tr_\Sigma(f) = f\chi_\Sigma$ . El operador traza es el operador  $Tr_\Sigma$  definido en  $D$ , que se extiende a un operador acotado  $Tr_\sigma : W^{1,2}(\mu)^4 \rightarrow L^2(\sigma)^4$ , donde  $\sigma$  es la medida de superficie de  $\Sigma$ .*

**Corolario 3.3.2** *La aplicación*

$$\Phi_\sigma(G\mu) = Tr_\sigma(\phi_m * G\mu) \quad , \quad \text{para toda } G \in L^2(\mu)^4,$$

*está bien definida, donde  $\Sigma = \text{supp}(\sigma)$ . Más aún:*

$$\|\Phi_\sigma(G\mu)\|_{L^2(\sigma)^4} \leq C \|G\|_{L^2(\mu)^4}$$

**Lema 3.3.3** *Se cumplen*

$$\langle \Phi(G\mu), F\mu \rangle_{\mathbb{X}} - \langle G\mu, \Phi(F\mu) \rangle_{\mathbb{X}} = 0 \quad , \quad \text{para toda } F, G \in L^2(\mu)^4 \quad (3.7)$$

y

$$\langle \Phi(g\sigma), F\mu \rangle_{\mathbb{X}} = \langle g\sigma, \Phi_\sigma(F\mu) \rangle_{\mathbb{X}} \quad , \quad \text{para toda } F \in L^2(\mu)^4, g \in L^2(\sigma)^4. \quad (3.8)$$

**Demostración:** La igualdad (3.7), se obtiene de la siguiente cuenta, usando la propiedad 2 del lema 3.2.2,

$$\begin{aligned} \langle \Phi(G\mu), F\mu \rangle_{\mathbb{X}} &= \iint \phi_m(x-y) G(y) d\mu(y) \overline{F(x)} d\mu(x) \\ &= \iint G(y) \overline{\phi_m(y-x)} \overline{F(x)} d\mu(x) d\mu(y) \\ &= \langle G\mu, \Phi(F\mu) \rangle_{\mathbb{X}}. \end{aligned}$$

A continuación mostramos la igualdad (3.8). Sean  $0 < \epsilon, \delta < 1$ , definimos las funciones truncadas:

$$F_\epsilon = F\chi_{\{x \in \mathbb{R}^3 \mid |x| < \frac{1}{\epsilon}, \text{dist}(x, \Sigma) > \epsilon\}} = F\chi_{\Omega_\epsilon} \quad , \quad g_\delta = g\chi_{\{x \in \Sigma \mid |x| < \frac{1}{\delta}\}} = g\chi_{\Sigma_\delta}.$$

Para las funciones  $F_\epsilon$  y  $g_\delta$ , se cumple la igualdad (3.8):

$$\begin{aligned}
 \langle g_\delta \sigma, \Phi_\sigma(F_\epsilon \mu) \rangle_{\mathbb{X}} &= \int_{\Sigma} g_\delta(x) \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\phi_m(x-y) F_\epsilon(y)} d\mu(y) d\sigma(x) \\
 &= \iint g_\delta(x) \overline{\phi_m(x-y) F_\epsilon(y)} d\mu(y) d\sigma(x) \\
 &= \iint \overline{\phi_m^t(x-y)} g_\delta(x) \overline{F_\epsilon(y)} d\sigma(x) d\mu(y) \\
 &= \iint \phi_m(y-x) g_\delta(x) \overline{F_\epsilon(y)} d\sigma(x) d\mu(y) \\
 &= \langle \Phi(g_\delta), F_\epsilon \mu \rangle_{\mathbb{X}}.
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

Denotamos  $A = \langle \Phi(g\sigma), F\mu \rangle - \langle g\sigma, \Phi_\sigma(F\mu) \rangle$ . Por el lema 3.3.1 y corolario 3.3.2, se cumplen las desigualdades:

$$\|\Phi(g - g_\delta)\sigma\|_{L^2(\mu)^4} \leq C \|g - g_\delta\|_{L^2(\sigma)^4}$$

y

$$\|\Phi_\sigma(F - F_\epsilon)\mu\|_{L^2(\sigma)^4} \leq C \|F - F_\epsilon\|_{L^2(\mu)^4}.$$

Entonces, usando (3.9),

$$\begin{aligned}
 A &= \langle \Phi(g\sigma - g_\delta\sigma), F\mu \rangle_{\mathbb{X}} + \langle \Phi(g_\delta\sigma), (F - F_\epsilon)\mu \rangle_{\mathbb{X}} + \langle \Phi(g_\delta\sigma), F_\epsilon\mu \rangle_{\mathbb{X}} \\
 &\quad - [\langle (g - g_\delta)\sigma, \Phi_\sigma(F\mu) \rangle_{\mathbb{X}} + \langle g_\delta\sigma, \Phi_\sigma((F - F_\epsilon)\mu) \rangle_{\mathbb{X}} + \langle g_\delta\sigma, \Phi_\sigma(F_\epsilon\mu) \rangle_{\mathbb{X}}] \\
 &= \langle \Phi(g\sigma - g_\delta\sigma), F\mu \rangle_{\mathbb{X}} + \langle \Phi(g_\delta\sigma), (F - F_\epsilon)\mu \rangle_{\mathbb{X}} \\
 &\quad - \langle (g - g_\delta)\sigma, \Phi_\sigma(F\mu) \rangle_{\mathbb{X}} - \langle g_\delta\sigma, \Phi_\sigma((F - F_\epsilon)\mu) \rangle_{\mathbb{X}}.
 \end{aligned}$$

Así

$$|A| \leq 2C \left( \|g - g_\delta\|_{L^2(\sigma)^4} \|F\|_{L^2(\mu)^4} + \|g_\delta\|_{L^2(\sigma)^4} \|F - F_\epsilon\|_{L^2(\mu)^4} \right) \xrightarrow{\epsilon, \delta \rightarrow 0} 0$$

Lo cual muestra la igualdad (3.8). ■

**Observación 8** ■ Para toda función  $f \in D$ ,  $\phi_m * Hf = f$ . Por lo tanto, distribucionalmente,

$$H(\Phi(G\mu + g\sigma)) = G\mu + g\sigma, \text{ para todo } G\mu + g\sigma \in \mathbb{X}.$$

■ Para  $G\mu + g\sigma \in \mathbb{X}$ , sea  $V : L^2(\mathbb{R}^3) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^2)$ , definida por

$$V(\Phi(G\mu + g\sigma)) = -g\sigma.$$

Veamos que  $V$  está bien definida. Sea  $\varphi = \Phi(G\mu + g\sigma) = \Phi(F\mu + f\sigma)$ , entonces  $H\varphi = G\mu + g\sigma = F\mu + f\sigma$  en el sentido de las distribuciones. Desde que las medidas  $\mu$  y  $\sigma$  son mutuamente singulares, se deduce que  $G\mu = F\mu$  y  $g\sigma = f\sigma$ . Por lo tanto,  $g = f$  en  $L^2(\sigma)^4$ , y  $V$  está bien definida.

- Para  $\varphi = \Phi(G\mu + g\sigma)$ , definimos  $H_V(\varphi) = (H + V)\varphi$ . Entonces

$$H_V(\varphi) = H\varphi + V\varphi = G\mu + g\sigma - g\sigma = G\mu.$$

**Definición 3.3.1** Sea  $\Lambda : L^2(\sigma)^4 \rightarrow L^2(\sigma)^4$  un operador acotado y autoadjunto. Definimos

$$D(H_V) = D_\Lambda = \{ \Phi(G\mu + \Lambda(Tr_\sigma(\phi * G\mu))\sigma) \mid G \in L^2(\mu)^4 \} \subset \mathbb{X}.$$

Para  $\varphi = \Phi(G\mu + \Lambda(Tr_\sigma(\phi * G\mu))\sigma) \in D_\Lambda$ , se tiene

$$V\varphi = -(\Lambda Tr_\sigma \phi_m * G\mu)\sigma, \quad H_V\varphi = G\mu. \quad (3.10)$$

En ese sentido, observamos que  $V$  está **determinado** por  $\Lambda$ .

A continuación enunciamos y demostramos el teorema principal de este capítulo.

**Teorema 3.3.1** Sea  $\Lambda : L^2(\sigma)^4 \rightarrow L^2(\sigma)^4$  un operador acotado y autoadjunto. Entonces,  $H_V$  restringido a  $D_\Lambda$  es un operador no acotado y autoadjunto en  $\mathbb{X}$ .

**Demostración:** La demostración está dividida en dos partes. Primero probamos que  $H_V$  es simétrico en  $D(\Lambda)$ , luego que  $D(H_V^*) \subset D_\Lambda$ .

- $H_V$  es simétrico en  $D_\Lambda$ . En efecto, sean

$$\varphi = \Phi(G\mu + g\sigma), \psi = \Phi(F\mu + f\sigma) \in D_\Lambda.$$

Entonces

$$\begin{aligned} \langle H_V\varphi, \psi \rangle_{\mathbb{X}} - \langle \varphi, H_V\psi \rangle_{\mathbb{X}} &= \langle G\mu, \Phi(F\mu + f\sigma) \rangle_{\mathbb{X}} - \langle \Phi(G\mu + g\sigma), F\mu \rangle_{\mathbb{X}} \\ &= \langle G\mu, \Phi(F\mu) \rangle_{\mathbb{X}} + \langle G\mu, \Phi(f\sigma) \rangle_{\mathbb{X}} - \langle \Phi(G\mu), F\mu \rangle_{\mathbb{X}} \\ &\quad - \langle \Phi(g\sigma), F\mu \rangle_{\mathbb{X}} \\ (\Phi \text{ simétrico}) &= \langle G\mu, \Phi(f\sigma) \rangle_{\mathbb{X}} - \langle \Phi(g\sigma), F\mu \rangle_{\mathbb{X}} \\ &= \langle \Phi_\sigma(G\mu), f\sigma \rangle_{\mathbb{X}} - \langle g\sigma, \Phi_\sigma(F\mu) \rangle_{\mathbb{X}} \\ &= \langle (Tr_\sigma \phi_m * G\mu)\sigma, f\sigma \rangle_{\mathbb{X}} - \langle g\sigma, (Tr_\sigma \phi_m * F\mu)\sigma \rangle_{\mathbb{X}} \\ &= \langle Tr_\sigma \phi_m * G\mu, \Lambda(Tr_\sigma \phi_m * F\mu) \rangle_{L^2(\sigma)^4} \\ &\quad - \langle \Lambda(Tr_\sigma \phi_m * G\mu), Tr_\sigma \phi_m * F\mu \rangle_{L^2(\sigma)^4} \\ (\Lambda \text{ autoadjunto}) &= 0 \end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\langle H_V\varphi, \psi \rangle_{\mathbb{X}} = \langle \varphi, H_V\psi \rangle_{\mathbb{X}}, \quad \text{para todo } \varphi, \psi \in D_\Lambda.$$

- A continuación mostramos que  $D(H_V^*) \subset D_\Lambda$ . Es decir, si  $\psi \in L^2(\mu)^4$  tal que existe  $\psi^* \in L^2(\mu)^4$  cumpliendo

$$\langle H_V \varphi, \psi \rangle_{\mathbb{X}} = \langle \varphi, \psi^* \rangle_{\mathbb{X}}, \quad \text{para todo } \varphi \in D_\Lambda, \quad (3.11)$$

debemos mostrar que  $\psi \in D_\Lambda$  y  $H_V \psi = \psi^*$ .

Sea  $\psi$  que satisface (3.11). Desde que  $\psi^* \in L^2(\mu)^4$ ;  $\psi^* = F\mu$  para algún  $F \in L^2(\mu)^4$ . Sea  $\varphi = \Phi(G\mu + g\sigma) \in D_\Lambda$ . Entonces:

$$\begin{aligned} \langle G\mu, \psi \rangle_{\mathbb{X}} &= \langle H_V \varphi, \psi \rangle_{\mathbb{X}} = \langle \varphi, \psi^* \rangle_{\mathbb{X}} \\ &= \langle \Phi(G\mu + g\sigma), F\mu \rangle_{\mathbb{X}} \\ &= \langle G\mu, \Phi(F\mu) \rangle_{\mathbb{X}} + \langle g\sigma, \Phi_\sigma(F\mu) \rangle_{\mathbb{X}} \end{aligned} \quad (3.12)$$

Por otro lado, si definimos  $f = \Lambda((Tr\phi_m * F\mu)\sigma)$ ,

$$\begin{aligned} \langle g\sigma, \Phi_\sigma(F\mu) \rangle_{\mathbb{X}} &= \langle \Lambda(Tr_\sigma \phi_m * G\mu) \sigma, (Tr\phi_m * F\mu) \sigma \rangle_{\mathbb{X}} \\ &= \langle (Tr_\sigma \phi_m * G\mu) \sigma, \Lambda((Tr\phi_m * F\mu)) \sigma \rangle_{\mathbb{X}} \\ &= \langle \Phi_\sigma(G\mu), f\sigma \rangle_{\mathbb{X}} \\ &= \langle G\mu, \Phi(f\sigma) \rangle_{\mathbb{X}}, \end{aligned}$$

Reemplazando esta igualdad en (3.11), se tiene

$$\langle G\mu, \psi \rangle_{\mathbb{X}} = \langle G\mu, \Phi(F\mu) \rangle_{\mathbb{X}} + \langle G\mu, \Phi(f\sigma) \rangle_{\mathbb{X}} = \langle G\mu, \Phi(F\mu + f\sigma) \rangle_{\mathbb{X}},$$

para toda  $G \in L^2(\mu)^4$ .

Entonces  $\psi = \Phi(F\mu + f\sigma) \in L^2(\mu)^4$  y  $f = \Lambda((Tr\phi_m * F\mu)\sigma)$ . Por lo tanto  $\psi \in D_\Lambda$ . Luego

$$H_V(\psi) = H(\psi) + V(\psi) = F\mu + f\sigma - f\sigma = F\mu = \psi^*,$$

entonces  $D(H_V^*) \subset D_\Lambda$ . Concluimos que  $H_V$  es un operador autoadjunto en  $D_\Lambda$ . ■

**Corolario 3.3.3** Sea  $\Lambda : L^2(\sigma)^4 \rightarrow L^2(\sigma)^4$  un operador acotado y autoadjunto. Definimos

$$D_\Lambda = \{ \varphi + \phi_m * (\Lambda Tr_\sigma(\varphi)\sigma) \mid \varphi \in W^{1,2}(\mu)^4 \} \subset L^2(\mu)^4$$

y  $H_V = H + V$  sobre  $D_\Lambda$  como

$$H_V(\varphi + \phi_m * (\Lambda Tr_\sigma(\varphi)\sigma)) = H\varphi \in L^2(\mu)^4.$$

Entonces  $H_V$  es autoadjunto en  $D_\Lambda$ .

**Observación 9** Para  $f \in L^2(\sigma)^4$ ,  $(\phi_m * f\sigma)(x) = \int_{\Sigma} \phi_m(x-y)f(y)d\sigma(y)$  con  $x \in \Sigma^c$ . Se cumple que, si  $\mathbb{R}^3 = \Omega_+ \cup \Omega_-$ ,  $\partial\Omega_+ = \partial\Omega_- = \Sigma$  y  $N$  denota el vector normal exterior a  $\partial\Omega_+$ ,

$$\lim_{\substack{x \rightarrow z \\ \text{no tangencial} \\ x \in \Omega_{\pm}}} (\phi_m * f\sigma)(x) = \mp \frac{i}{2}(\alpha \cdot N(z))f(z) + C_{\sigma}f(z) \quad , \quad \text{para } \sigma - \text{c.t.p } z \in \Sigma, \quad (3.13)$$

donde:

$$C_{\sigma} : L^2(\sigma)^4 \rightarrow L^2(\sigma)^4 \quad , \quad C_{\sigma}f(z) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{|z-y| > \epsilon} \phi_m(z-y)f(y)d\sigma(y),$$

que es un operador acotado. Veamos una situación similar, para tener una idea de la veracidad de (3.13). Si tomamos  $\Sigma = \mathbb{R} \times \{0\} \subset \mathbb{R}^2$ . Sea  $f \in L^2(\mathbb{R})$  ó  $C_c^{\infty}(\mathbb{R})$ . Para  $\epsilon$  suficientemente pequeño, sea  $z = x + i\epsilon$ . Entonces

$$\frac{1}{z} = \frac{1}{x + i\epsilon} = \frac{x - i\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} = \frac{x}{x^2 + \epsilon^2} - i \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} = Q_{\epsilon} + P_{\epsilon},$$

donde  $P_{\epsilon}$  es un múltiplo del núcleo de Poisson y  $Q_{\epsilon}$  del de Poisson conjugado. Por lo cual

$$\text{cte } \lim_{\epsilon \rightarrow 0^{\pm}} P_{\epsilon}f = \pm f$$

$$\text{cte } \lim_{\epsilon \rightarrow 0^{\pm}} Q_{\epsilon}f = Hf(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{|x-y| > \epsilon} \frac{f(y)}{x-y} dy \quad , \quad x \in \mathbb{R},$$

véase, por ejemplo, ([12]).

Hasta ahora hemos visto que, dado  $\Lambda$ , se puede definir  $V$  mediante (3.10). Ahora nos preguntamos lo siguiente: dado  $V$ , ¿Podemos encontrar  $\Lambda$  tal que se verifique (3.10)? Veamos que, bajo ciertas condiciones sobre  $V$ , es posible conocer el respectivo  $\Lambda$  asociado.

En efecto, sea  $\psi = \varphi + \phi_m * (\Lambda Tr_{\sigma}\varphi)$  para algún  $\Lambda$ . De la observación 9, se cumple que

$$\psi_{\pm}(x) = \lim_{\substack{z \rightarrow x \\ z \in \Omega_{\pm}}} \psi(z) = Tr_{\sigma}\varphi \mp \frac{i}{2}(\alpha \cdot N)\Lambda Tr_{\sigma}\varphi + C_{\sigma}(\Lambda Tr_{\sigma}\varphi).$$

y si imponemos que, por ejemplo,

$$V(\psi) = a(\psi_+ + \psi_-) = a(2Tr_{\sigma}\varphi + 2C_{\sigma}(\Lambda Tr_{\sigma}\varphi)), \quad (3.14)$$

de (3.10), sabemos que  $V$  debe verificar

$$V(\psi) = -\Lambda Tr_{\sigma}\varphi. \quad (3.15)$$

De (3.14) y (3.15),  $-\Lambda Tr_{\sigma}\varphi = 2a(Tr_{\sigma}\varphi + C_{\sigma}(\Lambda Tr_{\sigma}\varphi))$ . Entonces:

$$-(1 + 2aC_{\sigma})\Lambda = 2a\mathbb{I}_d \quad , \quad \text{para todo } Tr_{\sigma}\varphi \text{ con } \varphi \in W^{1,2}(\mu)^4.$$

El operador  $1 + 2aC_\sigma$  es invertible para  $a \in \mathbb{R}$  suficientemente pequeño, debido a que  $C_\sigma$  es acotado (basta tomar  $2a \|C_\sigma\| < 1$ ). Usando un argumento de serie de Neumann, el operador  $\Lambda = 2a(1 + 2aC_\sigma)^{-1} : L^2(\sigma)^4 \rightarrow L^2(\sigma)^4$  es acotado. Más aún, es autoadjunto, ya que  $C_\sigma$  lo es. Con esta definición de  $\Lambda$  podemos definir  $D_\Lambda$  y  $H_V|_{D_\Lambda}$ ; y por el corolario 3.3.3,  $H_V$  es autoadjunto sobre  $D_\Lambda$ . Además,  $V(\psi) = a(\psi_+ + \psi_-)$  para toda  $\psi \in D_\Lambda$ .



## Capítulo 4

# Convexidad logarítmica de la ecuación de evolución de Schrödinger

En este capítulo se asume que el lector está familiarizado con Teoría de Espacios de Hilbert, Espacios  $L^p$ , Teoría de Operadores, Ecuación de Schrödinger y Análisis de Fourier. Para estos temas, por ejemplo, ver ([8], [17], [20], [26], [25]). Para mayores detalles de los resultados mostrados, consultar los artículos ([5], [14]); la tesina de máster de Aingeru ([18]) y las referencias contenidas en los mismos.

En esta parte del curso, probaremos de nuevo el hecho de que si tenemos una solución de la ecuación de Schrödinger

$$\partial_t u = i(\Delta u + Vu) \quad (4.1)$$

con decaimiento Gaussiano en tiempo  $t = 0, t = 1$ , entonces la solución de la ecuación tendrá decaimiento Gaussiano para todo tiempo entre medias. Esto es,

$$\|e^{|x|^2/\beta^2}u(0)\| + \|e^{|x|^2/\alpha^2}u(1)\| < +\infty \Rightarrow \|e^{\gamma(t)|x|^2}u(t)\| < +\infty \quad \forall t \in [0, 1],$$

donde  $\gamma(t)$  será una cierta función tal que  $\gamma(0) = 1/\beta^2$ ,  $\gamma(1) = 1/\alpha^2$ .

En la primera parte del curso se dio una prueba completamente formal de este resultado, mientras que en esta parte intentaremos dar una prueba más rigurosa.

Los dos problemas principales con los que nos vamos a encontrar son, por una parte, que necesitamos exigir cierta regularidad a nuestra solución, y por otra parte, necesitamos que la función

$$H(t) = \|e^{\gamma(t)|x|^2}u(t)\|^2$$

este bien definida para todo  $t \in [0, 1]$ . Para solventar estos problemas, vamos a tomar primero soluciones de la ecuación con difusión

$$\partial_t u = (A + iB)(\Delta u + V(x, t)u + F(x, t)), \quad A > 0, \quad B \in \mathbb{R}, \quad (4.2)$$

ecuación para la que se sabe

$$u(0) \in L^2[0, 1] \Rightarrow u \in L^\infty([0, 1], L^2(\mathbb{R}^n)) \cap L^2([0, 1], H^1(\mathbb{R}^n)).$$

Tendremos entonces que ahora nuestra solución es suficientemente regular para que los razonamientos que sigamos sean rigurosos. Una vez veamos que las soluciones de estas ecuaciones tienen decaimiento Gaussiano si se tiene decaimiento Gaussiano en los extremos, mediante un paso al límite en el que haremos tender el término de difusión  $A$  a 0, probaremos el resultado principal de esta parte. A modo de notación, por comodidad, cuando nos refiramos a la norma de una función en el espacio  $L^2(\mathbb{R}^n)$  no utilizaremos ningún subíndice. En caso contrario, indicaremos con la notación habitual en qué espacio estamos tomando la norma. Además, aunque nuestra solución (y más funciones que nos aparecerán más adelante) dependa de la variable espacial  $x$ , y de la temporal  $t$ , habitualmente escribiremos  $u(t)$  para referirnos a la solución, sobretodo a la hora de calcular normas en  $\mathbb{R}^n$ . Para empezar, veremos una primera estimación del decaimiento de una solución de la ecuación (4.2) que dependerá del decaimiento del dato inicial  $u(0)$ .

**Lema 4.0.4** *Supongamos que  $u \in L^\infty([0, 1], L^2(\mathbb{R}^n)) \cap L^2([0, 1], H^1(\mathbb{R}^n))$  verifica*

$$\partial_t u = (A + iB)(\Delta u + Vu + F),$$

con  $A > 0$  y  $B \in \mathbb{R}$ . Entonces

$$\begin{aligned} e^{-M_T} \|e^{\frac{\gamma A|x|^2}{A+4\gamma(A^2+B^2)T}} u(T)\| \\ \leq \|e^{\gamma|x|^2} u(0)\| + \sqrt{A^2 + B^2} \|e^{\frac{\gamma A|x|^2}{A+4\gamma(A^2+B^2)t}} F(t)\|_{L^1([0,T], L^2(\mathbb{R}^n))} \end{aligned}$$

cuando  $\gamma \geq 0, 0 \leq T \leq 1$  y  $M_T = \|A(\text{Re}V)^+ - B\text{Im}V\|_{L^1([0,T], L^\infty(\mathbb{R}^n))}$ .

### Demostración:

Sea  $v = e^\varphi u$  con  $\varphi = \varphi(x, t) \in \mathbb{R}$  una función que escogeremos más adelante, y escribamos la ecuación que verifica  $v$  en la forma

$$\partial_t v = \mathcal{S}v + \mathcal{A}v + (A + iB)e^\varphi F,$$

donde los operadores  $\mathcal{S}$  y  $\mathcal{A}$  son simétrico y antisimétrico respectivamente.

Si tenemos en cuenta que  $u = e^{-\varphi}v$ ,

$$\partial_t u = -e^{-\varphi}v\partial_t\varphi + e^{-\varphi}\partial_tv$$

$$\Delta u = -\Delta\varphi e^{-\varphi}v + |\nabla\varphi|^2 e^{-\varphi}v - 2\nabla\varphi \cdot \nabla v e^{-\varphi} + e^{-\varphi}\Delta v.$$

Estas relaciones nos permiten escribir la ecuación que verifica la función  $v(x, t)$  en la forma que buscamos, donde los operadores  $\mathcal{S}$  y  $\mathcal{A}$  son

$$\begin{aligned}\mathcal{S} &= A(\Delta + |\nabla\varphi|^2) - iB(2\nabla\varphi \cdot \nabla + \Delta\varphi) + (\partial_t\varphi + A\operatorname{Re}V - B\operatorname{Im}V), \\ \mathcal{A} &= iB(\Delta + |\nabla\varphi|^2) - A(2\nabla\varphi \cdot \nabla + \Delta\varphi) + i(B\operatorname{Re}V + A\operatorname{Im}V).\end{aligned}$$

Integrando por partes, se ve fácilmente que estos operadores son simétrico y antisimétrico, respectivamente. De manera formal,

$$\partial_t \|v\|^2 = (\partial_t v, v) + (v, \partial_t v) = 2\operatorname{Re}(\mathcal{S}v, v) + 2\operatorname{Re}((A + iB)e^\varphi F, v)$$

cuando  $t \geq 0$ . Integrando por partes,

$$\begin{aligned}\operatorname{Re}(\mathcal{S}v, v) &= -A \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla v|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^n} (A|\nabla\varphi|^2 + \partial_t\varphi)|v|^2 dx \\ &\quad + 2B\operatorname{Im} \int_{\mathbb{R}^n} \bar{v}\nabla\varphi \cdot \nabla v dx + \int_{\mathbb{R}^n} (A\operatorname{Re}V - B\operatorname{Im}V)|v|^2 dx\end{aligned}$$

y aplicando la **desigualdad de Cauchy-Schwarz**

$$\partial_t \|v(t)\|^2 \leq 2\|A(\operatorname{Re}V(t))^+ - B\operatorname{Im}V(t)\|_\infty \|v(t)\|^2 + 2\sqrt{A^2 + B^2}\|e^\varphi F(t)\| \|v(t)\| \quad (4.3)$$

cuando

$$(A + B^2/A)|\nabla\varphi|^2 + \partial_t\varphi \leq 0 \quad \text{en } \mathbb{R}_+^{n+1}. \quad (4.4)$$

Esto nos permite que al acotar el término  $2\operatorname{Re}(\mathcal{S}v, v)$ , nos quede un término negativo más el primer término en la acotación que hemos dado para  $\partial_t \|v(t)\|^2$ . Para esta acotación, utilizaremos la propiedad

$$2ab \leq k^2 a^2 + \frac{1}{k^2} b^2,$$

con  $a = B\nabla v$ ,  $b = \bar{v}\nabla\varphi$  y  $k^2 = A/B^2$ . De esta forma,

$$2B\operatorname{Im} \int_{\mathbb{R}^n} \bar{v}\nabla\varphi \cdot \nabla v dx \leq \frac{A}{B^2} \int_{\mathbb{R}^n} B^2 |\nabla v|^2 dx + \frac{B^2}{A} \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla\varphi|^2 |v|^2 dx,$$

y, al aplicar esta desigualdad, vemos que si se cumple la condición (4.4) entonces se obtiene (4.3). Cuando  $\varphi(x, t) = a(t)\phi(x)$ , la condición (4.4) se reescribe como

$$a(t)^2(A + B^2/A)|\nabla\phi(x)|^2 + a'(t)\phi(x) \leq 0.$$

De manera formal, exigiremos que  $\phi(x) = |x|^2$ . En ese caso, (4.4) se verifica cuando

$$\begin{cases} a'(t) = -4(A + B^2/A)a(t)^2, \\ a(0) = \gamma. \end{cases} \quad (4.5)$$

Para probar el Lema, utilizaremos el **método de la energía**. Si tenemos que

$$y'(t) + f(t)y(t) \leq g(t),$$

utilizando el método del factor integrante, deducimos que

$$e^{\int_0^T f(s) ds} y(T) - y(0) \leq \int_0^T e^{\int_0^t f(s) ds} g(t) dt \quad (4.6)$$

En nuestro caso, tendremos que

$$y(t) = \|v(t)\|, \quad f(t) = -\|A(\operatorname{Re} V(t))^+ - B\operatorname{Im} V(t)\|_\infty, \quad g(t) = \sqrt{A^2 + B^2} \|e^{\varphi(x,t)} F(t)\|.$$

Si sustituimos estos valores en (4.6), y tenemos en cuenta que

$$a(t) = \frac{\gamma A}{A + 4\gamma(A^2 + B^2)t}$$

es la solución de (4.5), y que  $e^{-M_t} \leq 1$  por ser  $M_t \geq 0$  para todo  $t \in [0, T]$ , llegamos, de manera formal, a la acotación del Lema. Para justificar todos los cálculos hechos en esta demostración, dado  $\gamma > 0$ , truncamos  $|x|^2$  como

$$\phi_R(x) = \begin{cases} |x|^2, & |x| \leq R, \\ R^2, & |x| > R. \end{cases}$$

y regularizamos  $\phi_R$  con un mollifier estándar  $\theta_\rho$ , esto es, una función que verifica

$$\theta_\rho(y) = \frac{1}{\rho^n} \theta\left(\frac{y}{\rho}\right), \quad \text{con } \theta \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n), \text{ radial, par, positiva, y tal que } \int_{\mathbb{R}^n} \theta(y) dy = 1.$$

Llamamos

$$\varphi_{\rho,R}(x, t) = a(t)\theta_\rho * \phi_R(x), \quad v_{\rho,R} = e^{\varphi_{\rho,R}} u,$$

donde  $a(t)$  es la solución de la ecuación diferencial (4.5). Para estas funciones, todas las integrales son finitas y las integrales por partes están justificadas. Además, se verifica (4.4) ya que si escribimos la condición en estos términos tendremos gracias a las propiedades del mollifier

$$\begin{aligned} & \left( A + \frac{B^2}{A} \right) a^2(t) \left| \int_{|x-y| \leq R} \theta_\rho(y) 2(x-y) dy \right|^2 \\ & - 4 \left( A + \frac{B^2}{A} \right) a^2(t) \left[ \int_{|x-y| \leq R} \theta_\rho(y) |x-y|^2 dy + \int_{|x-y| > R} \theta_\rho(y) R^2 dy \right] \\ & \leq 4 \left( A + \frac{B^2}{A} \right) a^2(t) |x|^2 \left( \int_{|x-y| \leq R} \theta_\rho(y) dy \right)^2 \\ & - 4 \left( A + \frac{B^2}{A} \right) a^2(t) \left[ \int_{|x-y| \leq R} (|x|^2 + |y|^2) \theta_\rho(y) dy + \int_{|x-y| > R} \theta_\rho(y) R^2 dy \right] \\ & = 4 \left( A + \frac{B^2}{A} \right) a^2(t) |x|^2 \int_{|x-y| \leq R} \theta_\rho(y) dy \left[ \int_{|x-y| \leq R} \theta_\rho(y) dy - 1 \right] \\ & - 4 \left( A + \frac{B^2}{A} \right) a^2(t) \left[ \int_{|x-y| \leq R} |y|^2 \theta_\rho(y) dy + \int_{|x-y| > R} \theta_\rho(y) R^2 dy \right] \leq 0. \end{aligned}$$

Entonces, usando el método de la energía al igual que antes, pero ahora de forma rigurosa, se cumple la desigualdad

$$\|v_{\rho,R}(T)\| \leq e^{M_T}(\|e^{\gamma|x|^2}u(0)\| + \sqrt{A^2 + B^2}\|e^{\varphi_{\rho,R}}F\|_{L^1([0,T],L^2(\mathbb{R}^n))})$$

de manera uniforme en  $\rho$  y  $R$ . Como, de nuevo por las propiedades del mollifier,  $\theta_\rho * \phi_R(x) \leq |x|^2 + C\rho^2$ , tomando el límite cuando  $\rho$  tiende a cero y  $R$  tiende a infinito, se sigue la estimación del Lema de forma rigurosa gracias al **Lema de Fatou**. ■

A continuación, veremos un Lema abstracto para operadores simétricos y antisimétricos que nos dirá bajo que condiciones tenemos propiedades del tipo de convexidad logarítmica. De esta forma, aplicando este resultado a una solución de la ecuación anterior, el decaimiento Gaussiano en tiempo  $t \in [0, 1]$  dependerá del decaimiento en los extremos del intervalo.

**Lema 4.0.5** *Supongamos que  $\mathcal{S}$  es un operador simétrico,  $\mathcal{A}$  es un operador antisimétrico, ambos dependiendo de la variable temporal  $t$ ,  $G$  es una función positiva y  $f(x, t)$  es una función razonable. Sean, además,*

$$H(t) = (f, f), \quad D(t) = (\mathcal{S}f, f), \quad \partial_t \mathcal{S} = \mathcal{S}_t, \quad N(t) = \frac{D(t)}{H(t)}.$$

Entonces

$$\begin{aligned} \partial_t^2 H = & 2\partial_t \text{Re}(\partial_t f - \mathcal{S}f - \mathcal{A}f, f) + 2(\mathcal{S}_t f + [\mathcal{S}, \mathcal{A}]f, f) \\ & + \|\partial_t f - \mathcal{A}f + \mathcal{S}f\|^2 - \|\partial_t f - \mathcal{A}f - \mathcal{S}f\|^2 \end{aligned} \quad (4.7)$$

y

$$\dot{N}(t) \geq (\mathcal{S}_t f + [\mathcal{S}, \mathcal{A}]f, f)/H - \|\partial_t f - \mathcal{A}f - \mathcal{S}f\|^2/2H. \quad (4.8)$$

Además, si

$$|\partial_t f - \mathcal{A}f - \mathcal{S}f| \leq M_1|f| + G \quad \text{en } \mathbb{R}^n \times [0, 1], \quad \mathcal{S}_t + [\mathcal{S}, \mathcal{A}] \geq -M_0, \quad (4.9)$$

y

$$M_2 = \sup_{[0,1]} \|G(t)\|/\|f(t)\|$$

es finito, entonces  $H(t)$  es “logarítmicamente convexa” en  $[0, 1]$  y existe una constante universal  $N$  tal que

$$H(t) \leq e^{N(M_0+M_1+M_2+M_1^2+M_2^2)} H(0)^{1-t} H(1)^t, \quad \text{cuando } 0 \leq t \leq 1. \quad (4.10)$$

**Demostración:** Supongamos primero además que  $\partial_t f = \mathcal{S}f + \mathcal{A}f$ . Bajo esta nueva hipótesis es más fácil probar la convexidad logarítmica, ya que

$$\dot{H}(t) = 2\text{Re}(\partial_t f, f) = 2(\mathcal{S}f, f) = 2D(t),$$

$$\begin{aligned}\dot{D}(t) &= (\mathcal{S}_t f, f) + (\mathcal{S} \partial_t f, f) + (\mathcal{S} f, \partial_t f) = (\mathcal{S}_t f, f) + 2\operatorname{Re}(\mathcal{S} f, \partial_t f) \\ &= (\mathcal{S}_t f, f) + 2(\mathcal{S} f, \mathcal{S} f) + 2\operatorname{Re}(\mathcal{S} f, \mathcal{A} f) = (\mathcal{S}_t f + [\mathcal{S}, \mathcal{A}] f, f) + 2(\mathcal{S} f, \mathcal{S} f).\end{aligned}$$

Por lo tanto,  $\ddot{H}(t) = 2(\mathcal{S}_t f + [\mathcal{S}, \mathcal{A}] f, f) + 4(\mathcal{S} f, \mathcal{S} f)$  y

$$\partial_t^2(\log H) = \frac{\ddot{H}H - \dot{H}^2}{H^2} = \frac{2(\mathcal{S}_t f + [\mathcal{S}, \mathcal{A}] f, f)(f, f) + 4(\mathcal{S} f, \mathcal{S} f) - 4(\mathcal{S} f, f)(\mathcal{S} f, f)}{(f, f)^2},$$

luego si aplicamos la desigualdad de **Cauchy-Schwarz**, los dos últimos términos del numerador se cancelan, por lo que

$$\partial_t^2(\log H) \geq \frac{2(\mathcal{S}_t f + [\mathcal{S}, \mathcal{A}] f, f)}{(f, f)} \geq -2M_0,$$

y a partir de aquí se prueba la convexidad logarítmica siguiendo un proceso análogo al que veremos a continuación para el caso general. En el caso general, si derivamos  $H(t)$ , y tenemos en cuenta que  $\mathcal{S}$  es simétrico y  $\mathcal{A}$  es antisimétrico, es fácil ver que

$$\begin{aligned}\dot{H}(t) &= 2\operatorname{Re}(\partial_t f - \mathcal{S} f - \mathcal{A} f, f) + 2D(t), \\ \dot{H}(t) &= \operatorname{Re}(\partial_t f + \mathcal{S} f, f) + \operatorname{Re}(\partial_t f - \mathcal{S} f, f), \\ D(t) &= \frac{1}{2}\operatorname{Re}(\partial_t f + \mathcal{S} f, f) - \frac{1}{2}\operatorname{Re}(\partial_t f - \mathcal{S} f, f).\end{aligned}\tag{4.11}$$

Por otro lado, si derivamos  $D(t)$  y tenemos en cuenta que

$$([\mathcal{S}, \mathcal{A}] f, f) = 2\operatorname{Re}(\mathcal{A} f, \mathcal{S} f),$$

tenemos que

$$\dot{D}(t) = (\mathcal{S}_t f, f) + (\mathcal{S} \partial_t f, f) + (\mathcal{S} f, \partial_t f) = (\mathcal{S}_t f + [\mathcal{S}, \mathcal{A}] f, f) + 2\operatorname{Re}(\partial_t f - \mathcal{A} f, \mathcal{S} f),$$

que, teniendo en cuenta la identidad de polarización

$$4(x, y) = \|x + y\|^2 - \|x - y\|^2 - i(\|x + iy\|^2 - \|x - iy\|^2),$$

podemos escribir como

$$\dot{D}(t) = (\mathcal{S}_t f + [\mathcal{S}, \mathcal{A}] f, f) + \frac{1}{2}\|\partial_t f - \mathcal{A} f + \mathcal{S} f\|^2 - \frac{1}{2}\|\partial_t f - \mathcal{A} f - \mathcal{S} f\|^2.\tag{4.12}$$

Combinando la primera fórmula de (4.11) y (4.12), se obtiene (4.7). Si multiplicamos las dos últimas fórmulas en (4.11) y añadimos el término  $\operatorname{Re}(\mathcal{A} f, f) = 0$ , tenemos que

$$\dot{H}(t)D(t) = \frac{1}{2}(\operatorname{Re}(\partial_t f - \mathcal{A} f + \mathcal{S} f, f))^2 - \frac{1}{2}(\operatorname{Re}(\partial_t f - \mathcal{A} f - \mathcal{S} f, f))^2.\tag{4.13}$$

Para obtener la desigualdad del Lema, derivamos  $N(t)$  y utilizamos (4.13) y (4.12). Una vez calculado  $\dot{N}(t)$ , llegamos a la desigualdad (4.8) desechando los términos positivos en (4.12)

y en la igualdad resultante de derivar  $N(t)$ . Finalmente, si se verifica (4.9), gracias a (4.11) observamos que

$$\partial_t^2(\log H(t) + O(1)) \geq 0, \quad \text{cuando } 0 \leq t \leq 1,$$

donde  $|O(1)| \leq N(M_0 + M_1 + M_2 + M_1^2 + M_2^2)$  en  $[0, 1]$ . Deducimos entonces, por monotonía

$$\partial_s(\log H(s) + O(1)) \leq \partial_\tau(\log H(\tau) + O(1)), \quad \text{cuando } 0 \leq s \leq t \leq \tau \leq 1.$$

Integrando esta desigualdad en  $(s, \tau) \in [0, t] \times [t, 1]$ , llegamos a que

$$(1 - t)(\log H(t) - \log H(0) + O(1)) \leq t(\log H(1) - \log H(t) + O(1)),$$

y finalmente, agrupando términos y tomando exponenciales obtenemos la desigualdad (4.10). ■

Gracias a este Lema ya estamos en condiciones de probar la convexidad logarítmica de las soluciones de esta ecuación con difusión con decaimiento Gaussiano en los extremos del intervalo. A la hora de justificar los cálculos, daremos una idea orientativa de como se ha de proceder para la justificación de las cuentas, aunque por comodidad evitaremos dar todos los detalles.

**Lema 4.0.6** *Supongamos que  $u \in L^\infty([0, 1], L^2(\mathbb{R}^n)) \cap L^2([0, 1], H^1(\mathbb{R}^n))$  verifica*

$$\partial_t u = (A + iB)(\Delta u + Vu + F),$$

con  $A > 0, B \in \mathbb{R}, V$  tomando valores complejos,  $\gamma > 0$ , y

$$\sup_{[0,1]} \|V(t)\|_\infty \leq M_1.$$

Sea

$$M_2 = \sup_{[0,1]} \|e^{\gamma|x|^2} F(t)\| / \|u(t)\|$$

y supongamos que  $\|e^{\gamma|x|^2} u(0)\|, \|e^{\gamma|x|^2} u(1)\|$  y  $M_2$  son cantidades finitas. Entonces  $\|e^{\gamma|x|^2} u(t)\|$  es “logarítmicamente convexa” en  $[0, 1]$  y existe una constante  $N$  tal que

$$\|e^{\gamma|x|^2} u(t)\| \leq e^{N[(A^2+B^2)(M_1^2+M_2^2)+\sqrt{A^2+B^2}(M_1+M_2)]} \|e^{\gamma|x|^2} u(0)\|^{1-t} \|e^{\gamma|x|^2} u(1)\|^t \quad (4.14)$$

cuando  $0 \leq t \leq 1$ .

**Demostración:** Primero veamos la demostración formal para hacernos una idea de como probar la convexidad logarítmica. Si tomamos  $f = e^{\gamma\varphi} u$  con  $\varphi = \varphi(x)$  una función real que escogeremos más adelante, observamos que esta nueva función verifica

$$\partial_t f = \mathcal{S}f + \mathcal{A}f + (A + iB)(Vf + e^{\gamma\varphi} F), \quad \text{en } \mathbb{R}_+^{n+1}, \quad (4.15)$$

con operadores  $\mathcal{S}$  simétrico y  $\mathcal{A}$  antisimétrico

$$\begin{aligned}\mathcal{S} &= A(\Delta + \gamma^2|\nabla\varphi|^2) - iB\gamma(2\nabla\varphi \cdot \nabla + \Delta\varphi) + \gamma\partial_t\varphi, \\ \mathcal{A} &= iB(\Delta + \gamma^2|\nabla\varphi|^2) - A\gamma(2\nabla\varphi \cdot \nabla + \Delta\varphi).\end{aligned}$$

Calculando el conmutador, obtenemos

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_t + [\mathcal{S}, \mathcal{A}] &= \gamma\partial_t^2\varphi + 4\gamma^2 A\nabla\varphi \cdot \nabla\partial_t\varphi - 2iB\gamma(2\nabla\partial_t\varphi \cdot \nabla + \Delta\partial_t\varphi) \\ &\quad - \gamma(A^2 + B^2)[4\nabla \cdot (D^2\varphi\nabla) - 4\gamma^2 D^2\varphi\nabla\varphi \cdot \nabla\varphi + \Delta^2\varphi].\end{aligned}\tag{4.16}$$

De manera formal, si  $\varphi(x, t) = |x|^2$ , entonces

$$\mathcal{S}_t + [\mathcal{S}, \mathcal{A}] = -\gamma(A^2 + B^2)[8\Delta - 32\gamma^2|x|^2]$$

y, integrando por partes

$$(\mathcal{S}_t f + [\mathcal{S}, \mathcal{A}]f, f) = \gamma(A^2 + B^2) \int_{\mathbb{R}^n} (8|\nabla f|^2 + 32\gamma^2|x|^2|f|^2) dx \geq C_\gamma \int_{\mathbb{R}^n} |f|^2 \geq 0. \tag{4.17}$$

Donde hemos utilizado la **Desigualdad de Heisenberg-Pauli-Weyl**. Teniendo en cuenta (4.15), y que  $V$  está acotado,

$$|\partial_t f - \mathcal{S}f - \mathcal{A}f| = |(A + iB)(Vf + e^{\gamma\varphi}F)| \leq \sqrt{A^2 + B^2}(M_1|f| + e^{\gamma\varphi}|F|), \tag{4.18}$$

Luego si podemos justificar las cuentas que acabamos de hacer de forma rigurosa, podremos aplicar el lema 4.0.5 a la función  $f$ , con  $\tilde{M}_0 = 0$ ,  $\tilde{M}_1 = \sqrt{A^2 + B^2}M_1$  y  $\tilde{M}_2 = \sqrt{A^2 + B^2}M_2$  para concluir la convexidad logarítmica de  $\|e^{\gamma|x|^2}u(t)\|^2$  y (4.14). Para justificar los cálculos previos, necesitamos, por una parte, una función  $\varphi(x, t)$  tal que

$$\begin{aligned}(\mathcal{S}_t f + [\mathcal{S}, \mathcal{A}]f, f) &= 4\gamma(A^2 + B^2) \int_{\mathbb{R}^n} \nabla f \cdot D^2\varphi \overline{\nabla f} dx \\ &\quad + 4\gamma^3(A^2 + B^2) \int_{\mathbb{R}^n} D^2\varphi \nabla\varphi \cdot \nabla\varphi |f|^2 dx \\ &\quad - \gamma(A^2 + B^2) \int_{\mathbb{R}^n} \Delta^2\varphi |f|^2 dx > 0\end{aligned}$$

y, por otra parte, que esta función tenga un decaimiento en el infinito inferior al decaimiento Gaussiano. Para nuestra elección, los dos primeros sumandos serán positivos, pero el término del bilaplaciano no será positivo. Para esto, dado  $a \in (0, 1)$  tomaremos una función  $\eta(r) \in C^\infty(\mathbb{R})$  positiva tal que

$$\eta(r) = \begin{cases} 0, & \text{en } r \leq 1, \\ r^{-a}, & \text{en } r \geq 2. \end{cases}$$

A continuación, definimos una función radial  $\varphi_a$  de forma que se verifique

$$\begin{cases} \varphi_a''(r) - \frac{\varphi_a'(r)}{r} = -2a\eta(r), \\ \varphi_a(0) = 0 = \lim_{r \rightarrow +\infty} \varphi_a'(r). \end{cases}$$

Entonces,

$$\varphi_a''(r) - \frac{\varphi_a'(r)}{r} = r \left( \frac{1}{r} \varphi_a' \right)' = -2a\eta(r) \implies \left( \frac{1}{r} \varphi_a' \right)' = -\frac{2a}{r} \eta(r),$$

por lo que integrando esta última igualdad deducimos que

$$\varphi_a'(r) = 2ar \int_r^\infty \eta(t) \frac{dt}{t}.$$

Como el bilaplaciano de una función radial es

$$\Delta^2 \psi = \psi^{iv} + 2 \frac{n-1}{r} \psi''' + \frac{(n-3)(n-1)}{r^2} \left( \psi'' - \frac{\psi'}{r} \right), \quad (4.19)$$

necesitamos saber las derivadas de nuestra función  $\varphi_a$ , cuyo valor depende de  $r$ . En primer lugar, si  $r \geq 2$ , como en ese caso  $\eta(r) = r^{-a}$ , tenemos que

$$\varphi_a'(r) = 2ar \int_r^\infty t^{-a-1} dt = 2r^{1-a} \implies \begin{cases} \varphi_a''(r) = 2(1-a)r^{-a}, \\ \varphi_a'''(r) = -2a(1-a)r^{-a-1}, \\ \varphi_a^{iv}(r) = 2a(a+1)(1-a)r^{-a-2}. \end{cases}$$

Por otro lado, si  $0 \leq r \leq 1$ , como en el intervalo  $[r, 1]$  sabemos que  $\eta \equiv 0$ ,

$$\varphi_a'(r) = 2ar \int_1^\infty \eta(t) \frac{dt}{t} \implies \varphi_a''(r) = 2a \int_1^\infty \eta(t) \frac{dt}{t},$$

y dado que  $\varphi_a''$  es constante, entonces  $\varphi_a''' \equiv 0 \equiv \varphi_a^{iv}$ . Finalmente, si  $1 \leq r \leq 2$ , por construcción tenemos

$$\varphi_a''(r) - \frac{\varphi_a'(r)}{r} = r \left( \frac{\varphi_a'(r)}{r} \right)' = -2a\eta(r) \implies \left( \frac{\varphi_a'(r)}{r} \right)' = -\frac{2a\eta(r)}{r},$$

luego

$$\varphi_a''(r) = -2a\eta(r) + \frac{\varphi_a'(r)}{r} \implies \begin{cases} \varphi_a'''(r) = -2a\eta'(r) - \frac{2a\eta(r)}{r} = -2a \left( \eta'(r) + \frac{\eta(r)}{r} \right), \\ \varphi_a^{iv}(r) = -2a \left( \eta''(r) + \frac{\eta'(r)}{r} - \frac{\eta(r)}{r^2} \right). \end{cases}$$

Una vez obtenidas las expresiones de las derivadas de  $\varphi_a$ , podemos calcular el bilaplaciano mediante la fórmula (4.19), obteniendo

$$\Delta^2 \varphi_a = \begin{cases} 0, & \text{en } 0 \leq r \leq 1, \\ 2a \left( -\eta''(r) - (2n-1) \frac{\eta'(r)}{r} + (-n^2 + 2n) \frac{\eta(r)}{r^2} \right), & \text{en } 1 \leq r \leq 2, \\ -2a(a-n)(a-n+2)r^{-a-2}, & \text{en } 2 \leq r. \end{cases}$$

Por lo tanto, podemos observar que en  $r \leq 1$  el bilaplaciano es 0, y para  $r \geq 1$  el bilaplaciano es un valor que está multiplicado por  $a$ , lo cual nos indica que será muy pequeño cuando

$a$  sea muy pequeño. Hecho esto, necesitamos una cota para el término  $D^2\varphi_a \nabla\varphi_a \cdot \nabla\varphi_a$  que no tienda a cero cuando  $a$  tiende a cero. Como nuestra función  $\varphi_a$  es radial, si calculamos este término en coordenadas radiales, obtendremos que  $D^2\varphi_a \nabla\varphi_a \cdot \nabla\varphi_a = (\varphi'_a(r))^2 \varphi''_a(r)$ , luego tenemos que acotar la primera y segunda derivada de  $\varphi_a$ . Hay que observar que para  $0 \leq r \leq 1$  no hace falta dar una acotación, pues en ese caso hemos visto que  $\Delta^2\varphi_a = 0$ , y los otros dos términos de  $(\mathcal{S}_t f + [\mathcal{S}, \mathcal{A}]f, f)$  son positivos. Si  $1 \leq r \leq 2$ , entonces a partir de la expresión de  $\varphi'_a(r)$  obtenemos

$$\varphi'_a(r) = 2ar \int_r^\infty \eta(t) \frac{dt}{t} \geq 2ar \int_2^\infty \eta(t) \frac{dt}{t} = r^{2^{1-a}} \geq 2^{1-a},$$

$$\varphi''_a(r) = 2a \int_r^\infty \eta(t) \frac{dt}{t} - 2a\eta(r) \geq 2^{1-a} - 2a\eta(r),$$

luego  $(\varphi'_a(r))^2 \varphi''_a(r) \geq 8^{1-a} - 4^{1-a} 2a\eta(r)$  y vemos que este número tiende a 8 cuando  $a$  tiende a cero. Por otra parte, si  $2 \leq r$

$$\left. \begin{array}{l} \varphi'_a(r) = 2r^{1-a} \\ \varphi''_a(r) = 2(1-a)r^{-a} \end{array} \right\} \implies (\varphi'_a(r))^2 \varphi''_a(r) = 8(1-a)r^{2-3a} \geq (1-a)2^{2-3a},$$

para  $a$  suficientemente pequeño (basta con que  $a < 2/3$ ), y de nuevo, tomando el límite cuando  $a$  tiende a cero, vemos que esta cantidad tiende a 32. Por lo tanto, si consideramos  $f_a = e^{\gamma\varphi_a}u$ , dados  $\gamma, A, B$ , existe  $a_0 > 0$  tal que para  $a \leq a_0$

$$(\mathcal{S}_t f_a + [\mathcal{S}, \mathcal{A}]f_a, f_a) > 0.$$

Si ahora tomamos  $H_a(t) = \|f_a\|^2$  con  $0 < a \leq a_0$ , como tenemos un decaimiento más lento que el decaimiento Gaussiano, podemos utilizar la estimación del lema 4.0.4 y la regularidad interior de soluciones de la ecuación que estamos considerando con  $A > 0$  para garantizar que los cálculos realizados en 4.0.5 son finitos y correctos. Por lo tanto tendremos que  $H_a$  verifica la estimación (4.10) y (4.14) se verifica al tomar el límite cuando  $a$  tiende a cero, utilizando el **Lema de Fatou**, ya que así

$$\begin{aligned} \|e^{\gamma|x|^2}u(t)\| &\leq \liminf_{a \rightarrow 0} \|f_a(t)\|^2 \\ &\leq \liminf_{a \rightarrow 0} e^{N[(A^2+B^2)(M_1^2+M_2^2)+\sqrt{A^2+B^2}(M_1+M_2)]} H_a(0)^{1-t} H_a(1)^t \\ &= e^{N[(A^2+B^2)(M_1^2+M_2^2)+\sqrt{A^2+B^2}(M_1+M_2)]} \|e^{\gamma|x|^2}u(0)\|^{1-t} \|e^{\gamma|x|^2}u(1)\|^t. \end{aligned}$$

■

Antes de enunciar el resultado principal de este capítulo, introduciremos el concepto de transformada Appell, gracias al cual, aunque no tengamos el mismo decaimiento en los

extremos del intervalo, podremos reducirnos al caso en el que el decaimiento sea el mismo de manera muy sencilla. Supongamos que  $u(y, s)$  verifica, para  $A + iB \neq 0$ ,

$$\partial_s u = (A + iB)(\Delta u + V(y, s)u + F(y, s)), \quad \text{en } \mathbb{R}^n \times [0, 1],$$

y sean  $\alpha$  y  $\beta$  números positivos,  $\gamma \in \mathbb{R}$  y

$$\tilde{u}(x, t) = \left( \frac{\sqrt{\alpha\beta}}{\alpha(1-t) + \beta t} \right)^{n/2} u \left( \frac{\sqrt{\alpha\beta}x}{\alpha(1-t) + \beta t}, \frac{\beta t}{\alpha(1-t) + \beta t} \right) e^{\frac{(\alpha-\beta)|x|^2}{4(A+iB)(\alpha(1-t)+\beta t)}}.$$

Entonces  $\tilde{u}$  verifica

$$\partial_t \tilde{u} = (A + iB)(\Delta \tilde{u} + \tilde{V}(x, t)\tilde{u} + \tilde{F}(x, t)) \quad \text{en } \mathbb{R}^n \times [0, 1],$$

con

$$\begin{aligned} \tilde{V}(x, t) &= \frac{\alpha\beta}{(\alpha(1-t) + \beta t)^2} V \left( \frac{\sqrt{\alpha\beta}x}{\alpha(1-t) + \beta t}, \frac{\beta t}{\alpha(1-t) + \beta t} \right) \\ \tilde{F}(x, t) &= \left( \frac{\sqrt{\alpha\beta}}{\alpha(1-t) + \beta t} \right)^{n/2+2} F \left( \frac{\sqrt{\alpha\beta}x}{\alpha(1-t) + \beta t}, \frac{\beta t}{\alpha(1-t) + \beta t} \right) e^{\frac{(\alpha-\beta)|x|^2}{4(A+iB)(\alpha(1-t)+\beta t)}}. \end{aligned}$$

Además,

$$\|e^{\gamma|x|^p} \tilde{F}(t)\| = \frac{\alpha\beta}{(\alpha(1-t) + \beta t)^2} \|e^{\frac{\gamma(\alpha\beta)^{p/2}}{(\alpha s + \beta(1-s))^p} |y|^p + \frac{(\alpha-\beta)A}{4(A^2+B^2)(\alpha s + \beta(1-s))} |y|^2} F(s)\|$$

y

$$\|e^{\gamma|x|^p} \tilde{u}(t)\| = \|e^{\frac{\gamma(\alpha\beta)^{p/2}}{(\alpha s + \beta(1-s))^p} |y|^p + \frac{(\alpha-\beta)A}{4(A^2+B^2)(\alpha s + \beta(1-s))} |y|^2} u(s)\|$$

cuando  $s = \frac{\beta t}{\alpha(1-t) + \beta t}$  y  $\gamma \in \mathbb{R}$ . A nosotros nos interesará el caso en el que  $p = 2$ , caso en el que los dos sumandos de la exponencial tienen la misma potencia,  $|y|^2$ . Suponiendo que trabajamos con la ecuación de Schrödinger, es decir que elegimos  $A = 0, B = 1$ , tomando como  $\gamma = \frac{1}{\alpha\beta}$  y evaluando en los puntos  $t = 0 \Rightarrow s = 0$  y  $t = 1 \Rightarrow s = 1$  tenemos que

$$\|e^{|x|^2/\alpha\beta} \tilde{u}(0)\| = \|e^{|x|^2/\beta^2} u(0)\|,$$

$$\|e^{|x|^2/\alpha\beta} \tilde{u}(1)\| = \|e^{|x|^2/\alpha^2} u(1)\|.$$

Por lo tanto, esta nueva función tiene decaimiento Gaussiano en los extremos del intervalo con el mismo coeficiente para cada tiempo. Combinando la transformada Appell con los resultados previos probaremos la convexidad logarítmica para soluciones de la ecuación de Schrödinger.

**Teorema 4.0.2** *Supongamos que  $u \in C([0, 1], L^2(\mathbb{R}^n))$  verifica*

$$\partial_t u = i(\Delta u + V(x, t)u), \quad \text{en } \mathbb{R}^n \times [0, 1],$$

con  $V = V_1(x) + V_2(x, t)$ ,  $V_1$  es un potencial real,  $\|V_1\|_\infty \leq M_1$ , y que existen números positivos  $\alpha$  y  $\beta$  tal que

$$\|e^{|x|^2/\beta^2} u(0)\|, \|e^{|x|^2/\alpha^2} u(1)\|, \sup_{[0,1]} \|e^{\frac{|x|^2}{(\alpha t + (1-t)\beta)^2}} V_2(t)\|_\infty < +\infty.$$

Entonces  $\|e^{\frac{|x|^2}{(\alpha t + (1-t)\beta)^2}} u(t)\|^{\alpha t + (1-t)\beta}$  es “logarítmicamente convexa” en  $[0, 1]$  y existe  $N = N(\alpha, \beta)$  tal que

$$\|e^{\frac{|x|^2}{(\alpha t + (1-t)\beta)^2}} u(t)\| \leq e^{N(M_1 + M_2 + M_1^2 + M_2^2)} \|e^{|x|^2/\beta^2} u(0)\|^{\frac{\beta(1-t)}{\alpha t + \beta(1-t)}} \|e^{|x|^2/\alpha^2} u(1)\|^{\frac{\alpha t}{\alpha t + \beta(1-t)}}$$

cuando  $0 \leq t \leq 1$  y  $M_2 = \sup_{[0,1]} \|e^{\frac{|x|^2}{(\alpha t + \beta(1-t))^2}} V_2(t)\|_\infty e^{2 \sup_{[0,1]} \|\Im V_2(t)\|_\infty}$ .

**Demostración:** Podemos suponer, sin pérdida de generalidad, que  $\alpha < \beta$ . En caso de que  $\alpha = \beta$ , reemplazaríamos  $\beta$  por  $\beta + \delta$ , con  $\delta > 0$  y después tomaríamos el límite cuando  $\delta$  tiende a cero. Si  $\alpha > \beta$ , reemplazaríamos nuestra solución  $u$  por  $u_1 = \bar{u}(1 - t)$ . Lo primero que vamos a ver es que para nuestra solución  $u$  se verifica

$$N_1^{-1} \|u(0)\| \leq \|u(t)\| \leq N_1 \|u(0)\|, \quad \text{con } N_1 = e^{\sup_{[0,1]} \|\Im V_2(t)\|_\infty}, \quad \text{cuando } 0 \leq t \leq 1.$$

A partir de la ecuación que verifica  $u$  tenemos que

$$\partial_t \|u(t)\|^2 = 2\Re(\partial_t u, u) = -2\Im(\Delta u + V u, u) = -2\Im \int V_2(t) |u(t)|^2,$$

y, utilizando la desigualdad de Cauchy-Schwarz

$$-2 \sup_{[0,1]} \|\Im V_2(t)\|_\infty \|u(t)\|^2 \leq \partial_t \|u(t)\|^2 \leq 2 \sup_{[0,1]} \|\Im V_2(t)\|_\infty \|u(t)\|^2.$$

Si ahora dividimos esta cadena de desigualdades por  $\|u(t)\|^2$  e integramos en  $s \in [0, t]$ , concluimos

$$e^{-2 \sup_{[0,1]} \|\Im V_2(t)\|_\infty} \|u(0)\|^2 \leq \|u(t)\|^2 \leq e^{2 \sup_{[0,1]} \|\Im V_2(t)\|_\infty} \|u(0)\|^2.$$

Finalmente, tomando raíces cuadradas llegamos precisamente a

$$N_1^{-1} \|u(0)\| \leq \|u(t)\| \leq N_1 \|u(0)\|.$$

A continuación, definimos el operador  $H = \Delta + V_1(x)$  y denotemos por  $e^{t(A+iB)H} u_0$  la solución perteneciente a  $C([0, 1], L^2(\mathbb{R}^n))$  de

$$\begin{cases} \partial_t v = (A + iB)(\Delta v + V_1(x)v), & \text{en } \mathbb{R}^n \times [0, 1], \\ v(0) = u_0, \end{cases}$$

cuando  $A \geq 0$ . Por el **Principio de Duhamel**

$$u(t) = e^{itH}u(0) + i \int_0^t e^{i(t-s)H}(V_2(s)u(s)) ds \quad \text{en } \mathbb{R}^n \times [0, 1]. \quad (4.20)$$

Para  $0 \leq \epsilon \leq 1$ , definimos

$$F_\epsilon(t) = \frac{i}{\epsilon + i} e^{\epsilon t H} (V_2(t)u(t)), \quad (4.21)$$

$$u_\epsilon(t) = e^{(\epsilon+i)tH}u(0) + (\epsilon + i) \int_0^t e^{(\epsilon+i)(t-s)H} F_\epsilon(s) ds. \quad (4.22)$$

Entonces,  $u_\epsilon \in L^\infty([0, 1], L^2(\mathbb{R}^n)) \cap L^2([0, 1], H^1(\mathbb{R}^n))$  y verifica

$$\begin{cases} \partial_t u_\epsilon = (\epsilon + i)(Hu_\epsilon + F_\epsilon(t)), & \text{en } \mathbb{R}^n \times [0, 1], \\ u_\epsilon(0) = u(0). \end{cases}$$

Ya tenemos una función  $u_\epsilon$  que verifica una ecuación con un término de difusión, luego a esta función le podemos aplicar todos los resultados que hemos visto antes. Para obtener estimaciones en términos de nuestras hipótesis, utilizaremos de manera adecuada el lema 4.0.4. Utilizando las identidades

$$e^{(z_1+z_2)H} = e^{(z_2+z_1)H} = e^{z_1H}e^{z_2H}, \quad \text{cuando } \Re z_1, \Re z_2 \geq 0,$$

junto a (4.20), (4.21) y (4.22) se prueba que

$$u_\epsilon(t) = e^{\epsilon t H} u(t), \quad \text{cuando } 0 \leq t \leq 1. \quad (4.23)$$

En particular,  $u_\epsilon(1) = e^{\epsilon H} u(1)$ , y aplicando el lema 4.0.4 utilizando los valores  $A = \epsilon, B = 0, \gamma = 1/\alpha^2, F \equiv 0$  teniendo en cuenta también que  $u_\epsilon(0) = u(0)$  obtenemos

$$\begin{aligned} \|e^{\frac{|x|^2}{\alpha^2+4\epsilon}} u_\epsilon(1)\| &= \|e^{\frac{|x|^2}{\alpha^2+4\epsilon}} e^{\epsilon H} u(1)\| \leq e^{\epsilon \|V_1\|_\infty} \|e^{|x|^2/\alpha^2} u(1)\|, \\ \|e^{|x|^2/\beta^2} u_\epsilon(0)\| &= \|e^{|x|^2/\beta^2} u(0)\|. \end{aligned}$$

De nuevo aplicamos el 4.0.4, en este caso con  $A = \epsilon, B = 0, F \equiv 0$  y  $\gamma = 1/(\alpha t + \beta(1-t))^2$  y (4.21), obteniendo

$$\begin{aligned} \|e^{\frac{|x|^2}{(\alpha t + \beta(1-t))^2 + 4\epsilon t}} F_\epsilon(t)\| &= \|e^{\frac{|x|^2}{(\alpha t + \beta(1-t))^2 + 4\epsilon t}} \frac{i}{\epsilon + i} e^{\epsilon t H} (V_2(t)u(t))\| \\ &\leq e^{\epsilon \|V_1\|_\infty} \|e^{\frac{|x|^2}{(\alpha t + \beta(1-t))^2 + 4\epsilon t}} V_2(t)u(t)\| \\ &\leq e^{\epsilon \|V_1\|_\infty} \|e^{\frac{|x|^2}{(\alpha t + \beta(1-t))^2}} V_2(t)\|_\infty \|u(t)\| \end{aligned}$$

cuando  $0 \leq t \leq 1$ . Si definimos  $\alpha_\epsilon = \alpha + 2\epsilon$  y  $\beta_\epsilon = \beta + 2\epsilon$ , de las tres últimas desigualdades concluimos que

$$\|e^{|x|^2/\alpha_\epsilon^2} u_\epsilon(1)\| \leq e^{\epsilon \|V_1\|_\infty} \|e^{|x|^2/\alpha^2} u(1)\|, \quad \|e^{|x|^2/\beta_\epsilon^2} u_\epsilon(0)\| \leq \|e^{|x|^2/\beta^2} u(0)\|, \quad (4.24)$$

$$\|e^{\frac{|x|^2}{(\alpha_\epsilon t + \beta_\epsilon(1-t))^2}} F_\epsilon(t)\| \leq e^{\epsilon \|V_1\|_\infty} \|e^{\frac{|x|^2}{(\alpha t + \beta(1-t))^2}} V_2(t)\|_\infty \|u(t)\|. \quad (4.25)$$

Una nueva aplicación del 4.0.4 con  $A = \epsilon, B = 0, F \equiv 0, \gamma = 0$  junto a (4.21) y (4.23) muestra que

$$\|F_\epsilon(t)\| \leq e^{\epsilon \|V_1\|_\infty} \|V_2(t)\|_{L^\infty(\mathbb{R}^n)} \|u(t)\|, \quad \|u_\epsilon(t)\| \leq e^{\epsilon \|V_1\|_\infty} \|u(t)\| \quad (4.26)$$

cuando  $0 \leq t \leq 1$ . Definimos  $\gamma_\epsilon = 1/\alpha_\epsilon \beta_\epsilon$  y  $\tilde{u}_\epsilon$  como la función resultante de aplicar la transformada de Appell  $u_\epsilon$  cuando  $A = \epsilon, B = 1$  y  $\alpha, \beta$  son sustituidos por  $\alpha_\epsilon$  y  $\beta_\epsilon$ , esto es

$$\tilde{u}_\epsilon(x, t) = \left( \frac{\sqrt{\alpha_\epsilon \beta_\epsilon}}{\alpha_\epsilon(1-t) + \beta_\epsilon t} \right)^{n/2} u_\epsilon \left( \frac{\sqrt{\alpha_\epsilon \beta_\epsilon} x}{\alpha_\epsilon(1-t) + \beta_\epsilon t}, \frac{\beta_\epsilon t}{\alpha_\epsilon(1-t) + \beta_\epsilon t} \right) e^{\frac{(\alpha_\epsilon - \beta_\epsilon)|x|^2}{4(\epsilon + i)(\alpha_\epsilon(1-t) + \beta_\epsilon t)}}$$

Como  $\alpha < \beta$ ,  $\tilde{u}_\epsilon \in L^\infty([0, 1], L^2(\mathbb{R}^n)) \cap L^2([0, 1], H^1(\mathbb{R}^n))$  verificando

$$\partial_t \tilde{u}_\epsilon = (\epsilon + i)(\Delta \tilde{u}_\epsilon + \tilde{V}_1^\epsilon(x, t) \tilde{u}_\epsilon + \tilde{F}_\epsilon(x, t)), \quad \text{en } \mathbb{R}^n \times [0, 1],$$

donde  $\tilde{V}_1^\epsilon$  es un potencial real,

$$\tilde{V}_1^\epsilon(x, t) = \frac{\alpha_\epsilon \beta_\epsilon}{(\alpha_\epsilon(1-t) + \beta_\epsilon t)^2} V_1 \left( \frac{\sqrt{\alpha_\epsilon \beta_\epsilon} x}{\alpha_\epsilon(1-t) + \beta_\epsilon t} \right), \quad \sup_{[0, 1]} \|\tilde{V}_1^\epsilon(t)\|_\infty \leq \frac{\beta}{\alpha} M_1, \quad (4.27)$$

$$\begin{aligned} \tilde{F}_\epsilon(x, t) = & \\ & \left( \frac{\sqrt{\alpha_\epsilon \beta_\epsilon}}{\alpha_\epsilon(1-t) + \beta_\epsilon t} \right)^{\frac{n}{2}+2} F_\epsilon \left( \frac{\sqrt{\alpha_\epsilon \beta_\epsilon} x}{\alpha_\epsilon(1-t) + \beta_\epsilon t}, \frac{\beta_\epsilon t}{\alpha_\epsilon(1-t) + \beta_\epsilon t} \right) e^{\frac{(\alpha_\epsilon - \beta_\epsilon)|x|^2}{4(\epsilon + i)(\alpha_\epsilon(1-t) + \beta_\epsilon t)}}, \end{aligned}$$

$$\|e^{\gamma_\epsilon |x|^2} \tilde{F}_\epsilon(t)\| \leq \frac{\beta}{\alpha} \|e^{\frac{|x|^2}{(\alpha_\epsilon s + \beta_\epsilon(1-s))^2}} F_\epsilon(s)\|, \quad \|\tilde{F}_\epsilon(t)\| \leq \frac{\beta}{\alpha} \|F_\epsilon(s)\|, \quad (4.28)$$

y

$$\begin{aligned} \|e^{\gamma_\epsilon |x|^2} \tilde{u}_\epsilon(t)\| &= \|e^{\left[ \frac{1}{(\alpha_\epsilon s + \beta_\epsilon(1-s))^2} + \frac{(\alpha_\epsilon - \beta_\epsilon)\epsilon}{4(\epsilon^2 + 1)(\alpha_\epsilon s + \beta_\epsilon(1-s))} \right] |y|^2} u_\epsilon(s)\|, \\ \|\tilde{u}_\epsilon(t)\| &\leq \|u_\epsilon(s)\|, \end{aligned} \quad (4.29)$$

cuando  $s = \frac{\beta_\epsilon t}{\alpha_\epsilon(1-t) + \beta_\epsilon t}$ . Esta última identidad y (4.24) implican que

$$\|e^{\gamma_\epsilon |x|^2} \tilde{u}_\epsilon(0)\| \leq \|e^{|x|^2/\beta^2} u(0)\|, \quad \|e^{\gamma_\epsilon |x|^2} \tilde{u}_\epsilon(1)\| \leq e^{\epsilon \|V_1\|_\infty} \|e^{|x|^2/\alpha^2} u(1)\|. \quad (4.30)$$

Por otro lado, ya hemos visto que

$$N_1^{-1} \|u(0)\| \leq \|u(t)\| \leq N_1 \|u(0)\| \quad \text{cuando } 0 \leq t \leq 1, \quad N_1 = e^{\sup_{[0, 1]} \|\Im V_2(t)\|_\infty}, \quad (4.31)$$

y, si repetimos el proceso para llegar a (4.3), ahora con  $\tilde{u}_\epsilon(t)$ , vemos que se verifica

$$\partial_t \|\tilde{u}_\epsilon(t)\|^2 \leq 2\epsilon \|\tilde{V}_1^\epsilon(t)\|_\infty \|\tilde{u}_\epsilon(t)\|^2 + 2\sqrt{1 + \epsilon^2} \|\tilde{F}_\epsilon(t)\| \|\tilde{u}_\epsilon(t)\|.$$

Sea  $0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_m = 1$  una partición del intervalo  $[0, 1]$  uniformemente distribuida, donde elegiremos  $m$  más adelante. Si aplicamos a esta última desigualdad todas las estimaciones que hemos visto observamos que

$$\begin{aligned} \partial_t \|\tilde{u}_\epsilon(t)\|^2 &\leq 2\epsilon \frac{\beta}{\alpha} M_1 \|\tilde{u}_\epsilon(t)\|^2 + 2\sqrt{1 + \epsilon^2} \|\tilde{F}_\epsilon(t)\| \|\tilde{u}_\epsilon(t)\| \\ &\leq 2\epsilon \frac{\beta}{\alpha} M_1 e^{2\epsilon \|V_1\|_\infty} \|u(s)\|^2 + 2\frac{\beta}{\alpha} \sqrt{1 + \epsilon^2} e^{2\epsilon \|V_1\|_\infty} \sup_{[0,1]} \|V_2(t)\|_\infty \|u(s)\|^2 \\ &\leq 2\epsilon \frac{\beta}{\alpha} M_1 e^{2\epsilon \|V_1\|_\infty} N_1^2 \|u(0)\|^2 + 2\frac{\beta}{\alpha} \sqrt{1 + \epsilon^2} e^{2\epsilon \|V_1\|_\infty} \sup_{[0,1]} \|V_2(t)\|_\infty \|u(0)\|^2 N_1^2 \\ &= N_2^2 \|u(0)\|^2, \end{aligned}$$

donde  $N_2$  depende de  $\alpha, \beta, \|V_1\|_\infty$  y  $\sup_{[0,1]} \|V_2(t)\|_\infty$ . Si ahora, para  $t_{i-1} \leq t \leq t_i$  integramos esta desigualdad en  $s \in [t, t_i]$ ,

$$\|\tilde{u}_\epsilon(t_i)\|^2 \leq \|\tilde{u}_\epsilon(t)\|^2 + N_2^2 (t_i - t) \|u(0)\|^2 \leq \|\tilde{u}_\epsilon(t)\|^2 + N_2^2 \|u(0)\|^2 (t_i - t_{i-1}),$$

y, tomando raíces cuadradas concluimos

$$\|\tilde{u}_\epsilon(t_i)\| \leq \|\tilde{u}_\epsilon(t)\| + N_2 \sqrt{t_i - t_{i-1}} \|u(0)\|,$$

cuando  $t_{i-1} \leq t \leq t_i, 0 < \epsilon \leq 1$  y  $i = 1, \dots, m$ . Elegimos entonces  $m$  tal que

$$N_2 \max_{1 \leq i \leq m} \sqrt{t_i - t_{i-1}} \leq \frac{1}{4N_1}$$

Usando ahora que  $\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \|\tilde{u}_\epsilon(t)\| = \|u(s)\|$  y (4.31), para un  $\epsilon_0$  suficientemente pequeño se cumple

$$\|\tilde{u}_\epsilon(t_i)\| \geq \frac{\|u(s_i)\|}{2} \geq \frac{1}{2N_1} \|u(0)\|, \quad \text{cuando } 0 < \epsilon \leq \epsilon_0, \quad i = 1, \dots, m,$$

utilizando las tres ultimas desigualdades, tenemos que

$$\|\tilde{u}_\epsilon(t)\| \geq \frac{1}{4N_1} \|u(0)\|, \quad \text{cuando } 0 < \epsilon \leq \epsilon_0, \quad 0 \leq t \leq 1. \quad (4.32)$$

Nuestro objetivo es aplicar el lema 4.0.6 a la función  $\tilde{u}_\epsilon$ , por lo tanto, solo nos falta acotar el decaimiento de  $\tilde{F}_\epsilon(t)$  en términos de  $\tilde{u}_\epsilon(t)$ , cosa que ya podemos hacer gracias a esta última desigualdad.

$$\begin{aligned} \|e^{\gamma_\epsilon |x|^2} \tilde{F}_\epsilon(t)\| &\leq \frac{\beta}{\alpha} \|e^{\frac{|x|^2}{(\alpha_\epsilon s + (1-s)\beta_\epsilon)^2}} F_\epsilon(s)\| \leq \frac{\beta}{\alpha} e^{\epsilon \|V_1\|_\infty} \|e^{\frac{|x|^2}{(\alpha s + (1-s)\beta)^2}} V_2(s)\|_\infty \|u(s)\| \frac{\|\tilde{u}_\epsilon(t)\|}{\|\tilde{u}_\epsilon(t)\|} \\ &\leq \frac{\beta}{\alpha} e^{\epsilon \|V_1\|_\infty} \sup_{[0,1]} \|e^{\frac{|x|^2}{(\alpha s + (1-s)\beta)^2}} V_2(s)\|_\infty N_1 \|u(0)\| \frac{4N_1}{\|u(0)\|} \|\tilde{u}_\epsilon(t)\| \\ &= 4\frac{\beta}{\alpha} M_2(\epsilon) \|\tilde{u}_\epsilon(t)\|. \end{aligned}$$

De aquí deducimos que

$$\sup_{[0,1]} \frac{\|e^{\gamma\epsilon|x|^2} \tilde{F}_\epsilon(t)\|}{\|\tilde{u}_\epsilon(t)\|} \leq \frac{4\beta}{\alpha} M_2(\epsilon), \quad \text{cuando } 0 < \epsilon < \epsilon_0,$$

donde

$$M_2(\epsilon) = e^{2\sup_{[0,1]} \|\Im V_2(t)\|_\infty + \epsilon \|V_1\|_\infty} \sup_{[0,1]} \|e^{\frac{|x|^2}{(\alpha t + \beta(1-t))^2}} V_2(t)\|_\infty.$$

Podemos aplicar el lema 4.0.6 junto con las acotaciones (4.30) para concluir que  $\|e^{\gamma\epsilon|x|^2} \tilde{u}_\epsilon(t)\|$  es “logarítmicamente convexa” en  $[0, 1]$  y

$$\|e^{\gamma\epsilon|x|^2} \tilde{u}_\epsilon(t)\| \leq e^{N(M_1+M_2(\epsilon)+M_1^2+M_2(\epsilon)^2)} \|e^{|x|^2/\beta^2} u(0)\|^{1-t} \|e^{|x|^2/\alpha^2} u(1)\|^t$$

cuando  $0 < \epsilon \leq \epsilon_0$ . Teniendo en cuenta (4.29) y tomando el límite en estas desigualdad cuando  $\epsilon$  tiende a cero,

$$\|e^{\frac{|x|^2}{(\alpha s + (1-s)\beta)^2}} u(s)\| \leq e^{N(M_1+M_2+M_1^2+M_2^2)} \|e^{|x|^2/\beta^2} u(0)\|^{1-t} \|e^{|x|^2/\alpha^2} u(1)\|^t, \quad 0 \leq t \leq 1.$$

Ahora bien, recordamos que  $s = \frac{\beta t}{\alpha(1-t)+\beta t} \Rightarrow t = \frac{\alpha s}{\alpha s + (1-s)\beta}$ , luego si reescribimos esta desigualdad en términos de  $s$

$$\|e^{\frac{|x|^2}{(\alpha s + (1-s)\beta)^2}} u(s)\| \leq e^{N(M_1+M_2+M_1^2+M_2^2)} \|e^{|x|^2/\beta^2} u(0)\|^{\frac{(1-s)\beta}{\alpha s + (1-s)\beta}} \|e^{|x|^2/\alpha^2} u(1)\|^{\frac{\alpha s}{\alpha s + (1-s)\beta}},$$

cuando  $0 \leq s \leq 1$ , justo la desigualdad del Teorema. ■

**Observación 10** *Es necesario tomar una partición del intervalo  $[0, 1]$  dado que la convergencia de  $\|\tilde{u}_\epsilon(t)\|$  a  $\|u(s)\|$  no es uniforme, luego no tenemos un  $\epsilon$  genérico para cualquier  $t$ . En cambio, una vez hemos hecho la partición del intervalo, el número de nodos de la partición es finito y por tanto, si que vamos a tener un  $\epsilon_0$  para el cuál podamos acotar  $\|\tilde{u}_\epsilon(t_i)\|$  para todo  $i = 1, \dots, m$ .*

Para terminar con esta parte del curso, veremos una estimación para el decaimiento del gradiente de la solución de la ecuación de Schrödinger. Como antes, primero necesitamos un resultado previo para el caso en el que trabajamos con una ecuación con un término de difusión, para luego, mediante un proceso análogo al que acabamos de realizar, concluir la estimación para la solución de la ecuación de Schrödinger.

**Lema 4.0.7** *Supongamos que estamos en las condiciones del lema 4.0.6, que  $\gamma > 0$  y  $\sup_{[0,1]} \|V(t)\|_\infty \leq M_1$ . Entonces*

$$\begin{aligned} & \|\sqrt{t(1-t)} e^{\gamma|x|^2} \nabla u\|_{L^2(\mathbb{R}^n \times [0,1])} + \|\sqrt{t(1-t)} |x| e^{\gamma|x|^2} u\|_{L^2(\mathbb{R}^n \times [0,1])} \\ & \leq N[(1 + M_1) \sup_{[0,1]} \|e^{\gamma|x|^2} u(t)\| + \sup_{[0,1]} \|e^{\gamma|x|^2} F\|], \end{aligned} \quad (4.33)$$

donde  $N$  esta acotado cuando  $\gamma$  y  $A^2 + B^2$  están acotados inferiormente.

**Demostración:** Sea  $f = e^{\gamma|x|^2}u$ , primero vamos a probar que

$$\int_{\mathbb{R}^n} (|\nabla f|^2 + 4\gamma^2|x|^2|f|^2) dx = \int_{\mathbb{R}^n} e^{2\gamma|x|^2} (|\nabla u|^2 - 2n\gamma|u|^2) dx. \quad (4.34)$$

Si desarrollamos el término de la izquierda,

$$|\nabla f|^2 + 4\gamma^2|x|^2|f|^2 = e^{2\gamma|x|^2} (4\gamma^2|x|^2|u|^2 + |\nabla u|^2 + 4\gamma \operatorname{Re}(xu \cdot \overline{\nabla u}) + 4\gamma^2|x|^2|u|^2).$$

Para el término con la parte real, integraremos por partes, de modo que

$$4\gamma \operatorname{Re} \int e^{2\gamma|x|^2} xu \cdot \overline{\nabla u} = -16\gamma^2 \int |x|^2|u|^2 e^{2\gamma|x|^2} - 4n\gamma \int e^{2\gamma|x|^2} |u|^2 - 4\gamma \operatorname{Re} \int e^{2\gamma|x|^2} x\overline{u} \cdot \nabla u,$$

y si agrupamos la primera y última integral, que son iguales, tenemos que

$$4\gamma \operatorname{Re} \int e^{2\gamma|x|^2} xu \cdot \overline{\nabla u} = -8\gamma^2 \int |x|^2|u|^2 e^{2\gamma|x|^2} - 2n\gamma \int e^{2\gamma|x|^2} |u|^2.$$

Para probar la igualdad que queremos, ya solo nos falta integrar la expresión que tenemos para el gradiente de  $f$  y para  $|x|^2|f|^2$  y en el término de la parte real sustituir por las integrales que acabamos de calcular. Por otro lado, teniendo en cuenta la **Desigualdad de Heisenberg-Pauli-Weyl**

$$n \int_{\mathbb{R}^n} |f|^2 \leq 2 \left( \int_{\mathbb{R}^n} |x|^2|f|^2 \right)^{1/2} \left( \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla f|^2 \right)^{1/2},$$

y que  $2ab \leq a^2 + b^2$ , observamos que

$$2\gamma n \int_{\mathbb{R}^n} |f|^2 dx \leq 2 \left( \int_{\mathbb{R}^n} 4\gamma^2|x|^2|f|^2 \right)^{1/2} \left( \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla f|^2 \right)^{1/2} \leq \int_{\mathbb{R}^n} (|\nabla f|^2 + 4\gamma^2|x|^2|f|^2) dx. \quad (4.35)$$

Sumando (4.34) y (4.35), obtenemos la desigualdad

$$2 \int_{\mathbb{R}^n} (|\nabla f|^2 + 4\gamma^2|x|^2|f|^2) dx \geq \int_{\mathbb{R}^n} e^{2\gamma|x|^2} |\nabla u|^2 dx. \quad (4.36)$$

Ahora, multiplicamos (4.7) por  $t(1-t)$  e integramos por partes para obtener

$$\begin{aligned} & 2 \int_0^1 t(1-t) (\mathcal{S}_t f + [\mathcal{S}, \mathcal{A}]f, f) dt + 2 \int_0^1 H(t) dt \\ & \leq H(1) + H(0) + 2 \int_0^1 (1-2t) \operatorname{Re}(\partial_t f - \mathcal{S}f - \mathcal{A}f, f) dt \\ & \quad + \int_0^1 t(1-t) \|\partial_t f - \mathcal{A}f - \mathcal{S}f\|^2 dt, \end{aligned} \quad (4.37)$$

donde  $H(t) = \|f(t)\|^2$ . Recordamos que el conmutador era

$$(\mathcal{S}_t f + [\mathcal{S}, \mathcal{A}]f, f) = \gamma(A^2 + B^2) \int_{\mathbb{R}^n} (8|\nabla f|^2 + 32\gamma^2|x|^2|f|^2) dx.$$

Por otro lado,

$$H(1) + H(0) = \|e^{\gamma|x|^2}u(1)\|^2 + \|e^{\gamma|x|^2}u(0)\|^2 \leq 2 \sup_{[0,1]} \|e^{\gamma|x|^2}u(t)\|^2,$$

$$|(\partial_t f - \mathcal{S}f - \mathcal{A}f, f)| \leq \sqrt{A^2 + B^2} (M_1 \sup_{[0,1]} \|e^{\gamma|x|^2}u(t)\|^2 + \sup_{[0,1]} \|e^{\gamma|x|^2}u(t)\| \sup_{[0,1]} \|e^{\gamma|x|^2}F(t)\|),$$

$$\|\partial_t f - \mathcal{A}f - \mathcal{S}f\|^2 \leq (A^2 + B^2)(M_1^2 \sup_{[0,1]} \|e^{\gamma|x|^2}u(t)\|^2 + \sup_{[0,1]} \|e^{\gamma|x|^2}F(t)\|^2).$$

Si utilizamos estas tres desigualdades, y luego juntamos los sumandos adecuadamente completando cuadrados, llegamos a

$$\begin{aligned} & 2\gamma(A^2 + B^2) \int_0^1 \int_{\mathbb{R}^n} t(1-t)(8|\nabla f|^2 + 32\gamma^2|x|^2|f|^2) dx dt \\ & \leq N \left( (1 + M_1) \sup_{[0,1]} \|e^{\gamma|x|^2}u(t)\| + \sup_{[0,1]} \|e^{\gamma|x|^2}F(t)\| \right)^2 \end{aligned}$$

Para obtener la primera parte de la desigualdad (4.33), utilizamos (4.36) y tomamos raíces cuadradas en esta última desigualdad. Para obtener la segunda parte, simplemente desechamos de esta desigualdad el término en  $|\nabla f|^2$  y tomamos raíces cuadradas. De nuevo habría que justificar estos cálculos, para esto, como todos los cálculos son finitos para  $f(t) = e^{\gamma|x|^2}u(t)$  salvo  $|x|^2|f|^2$ , tomamos  $f_\rho = e^{(\gamma-\rho)|x|^2}u(t)$  de forma que podamos esconder este término escribiendo  $|x|^2$  como  $e^{\epsilon|x|^2}$ . Tendríamos entonces una desigualdad para  $f_\rho$ , con la que después de un paso al límite en el que hacemos  $\rho$  tender a cero probamos la desigualdad del Lema. ■

Como habíamos explicado antes, usando este Lema probamos un resultado análogo para una solución de la ecuación de Schrödinger. Si definimos  $u_\epsilon$  y  $F_\epsilon$  de la misma forma que en el teorema 4.0.2, este Lema nos dice que

$$\|\sqrt{t(1-t)}e^{\gamma_\epsilon|x|^2}\nabla u_\epsilon\|_{L^2(\mathbb{R}^n \times [0,1])} \leq N[(1 + M_1) \sup_{[0,1]} \|e^{\gamma_\epsilon|x|^2}u_\epsilon(t)\| + \sup_{[0,1]} \|e^{\gamma_\epsilon|x|^2}F_\epsilon(t)\|],$$

Utilizando las estimaciones que habíamos visto en el teorema 4.0.2 y hacemos  $\epsilon$  tender a cero vamos a obtener una estimación del decaimiento del gradiente de la solución en función del decaimiento de nuestra solución en los extremos del intervalo. Como  $a^{1-t}b^t \leq a + b$  esta estimación será

$$\|\sqrt{t(1-t)}e^{\gamma|x|^2}\nabla u\|_{L^2(\mathbb{R}^n \times [0,1])} \leq Ne^{N(M_1+M_2+M_1^2+M_2^2)}[\|e^{\gamma|x|^2}u(0)\| + \|e^{\gamma|x|^2}u(1)\|].$$

# Capítulo 5

## Apéndice

En este apéndice se desarrolla diversos temas, entre los cuales se encuentran Teoría de Espacios de Hilbert, Espacios  $L^p$ , Teoría de Operadores, Ecuaciones Diferenciales, véase, por ejemplo ([8]), ([12]), ([17]), ([20]), ([19]), ([26]) y ([25]), entre otros.

### 5.1. El Teorema Espectral para operadores autoadjuntos

Antes de demostrar el teorema espectral en su versión para operadores no acotados, vamos a demostrar y a entender la construcción de la versión para acotados. Consideremos  $A$  un operador simétrico, con cotas superior e inferior  $M$  y  $m$ , respectivamente (esto es,  $m\langle f, f \rangle \leq \langle Af, f \rangle \leq M\langle f, f \rangle, \forall f$ ). Si  $p$  es un polinomio con coeficientes complejos, podemos construir  $p(A)$  de la forma natural, siendo también simétrica. La correspondencia  $p \rightarrow p(A)$  es del tipo positivo ( $p(\lambda) \geq 0, \lambda \in [m, M] \rightarrow p(A) \geq 0$  como forma cuadrática), y consecuentemente dicha correspondencia es monótona ( $p(\lambda) \geq q(\lambda), \lambda \in [m, M] \rightarrow p(A) \geq q(A)$  como forma cuadrática).

Consideremos el espacio  $C := \{f : [m, M] \rightarrow \mathbb{R}_0^+, f \text{ es superiormente semicontinua}\}$ . Es conocido que si tenemos  $u \in C$ , existe una sucesión decreciente de polinomios  $\{p_n\}$  que converge uniformemente a  $u$ . Definimos la sucesión de operadores  $\{p_n(A)\}$ , que es decreciente e inferiormente acotada por 0 (vista como forma cuadrática). Usando un resultado para operadores acotados ([26]), dicha sucesión converge en norma. Definimos pues  $u(A) := \lim p_n(A)$ .

- $u(A)$  está bien definido (no depende de la sucesión tomada).

Tomemos dos sucesiones decrecientes de polinomios que convergen a  $u$ ,  $p_n$  y  $q_n$ . Entonces,  $\forall r, \exists s/p_s(\lambda) \leq q_r(\lambda) + \frac{1}{r}, q_s(\lambda) \leq p_r(\lambda) + \frac{1}{r}$  en  $[m, M]$ . Tomando límites primero en

r y después en s, obtenemos lo buscado.

- $u(A)$  es un operador simétrico.
- Si  $u_1 \leq u_2$  en  $[m, M] \Rightarrow u_1(A) \leq u_2(A)$  como forma cuadrática.
- Si  $V$  permuta con  $A$ , entonces  $V$  permuta con  $u(A)$

En particular, dentro de  $C$  están las proyecciones siguientes: fijado  $\mu \in \mathbb{R}$ , definimos

$$e_\mu(\lambda) := \begin{cases} 1 & \text{si } \lambda \leq \mu \\ 0 & \text{si } \lambda > \mu \end{cases}$$

Para cada  $\mu$ , definimos  $E_\mu := e_\mu(A)$ , definido por el procedimiento antes dado. La familia de operadores  $\{E_\mu\}_{\mu \in \mathbb{R}}$  verifica las siguientes propiedades:

1.  $e_\mu e_\nu = e_\mu$  si  $\mu \leq \nu \Rightarrow E_\mu E_\nu = E_\nu E_\mu = E_\mu$ , que se escribe como  $\mu \leq \nu \Rightarrow E_\mu \leq E_\nu$

2.

$$\begin{aligned} e_\mu &\equiv 0 & \text{si } \mu < m & \Rightarrow E_\mu = 0 & \text{si } \mu < m \\ e_\mu &\equiv 1 & \text{si } \mu \geq M & \Rightarrow E_\mu = Id & \text{si } \mu \geq M \end{aligned}$$

3.  $\mu \mapsto E_\mu$  es continua a la derecha.

Fijo  $\mu$ . Puedo tomar, que existe, una sucesión decreciente de polinomios  $\{p_n\}$  convergente a  $e_\mu$  verificando que  $p_n \geq e_{\mu + \frac{1}{n}}$ . Entonces,

$p_n(A) \geq E_{\mu + \frac{1}{n}} \geq E_\mu$ . Tomando límites en  $n$ , y como podemos hacer la misma cuenta para cualquier sucesión de números positivos decreciente a 0, tenemos que  $E_{\mu + \varepsilon} \longrightarrow E_\mu$  si  $\varepsilon \searrow 0$

Estas tres propiedades son las que definen a una familia espectral.

Tomemos ahora  $\mu < \lambda < \nu \Rightarrow \mu[e_\nu(\lambda) - e_\mu(\lambda)] \leq \lambda[e_\nu(\lambda) - e_\mu(\lambda)] \leq \nu[e_\nu(\lambda) - e_\mu(\lambda)] \Rightarrow \mu(E_\nu - E_\mu) \leq A(E_\nu - E_\mu) \leq \nu(E_\nu - E_\mu)$ . Si tomamos ahora una partición de  $[m, M]$ ,  $\mu_0 < m < \mu_1 < \dots < \mu_{n-1} < M \leq \mu_n$  y elegimos  $\mu = \mu_{k-1}$ ,  $\nu = \mu_k$ , y sumamos en  $k$  todas las desigualdades que tenemos obtenemos

$$\sum_{k=1}^n \mu_{k-1}(E_{\mu_k} - E_{\mu_{k-1}}) \leq \sum_{k=1}^n A(E_{\mu_k} - E_{\mu_{k-1}}) \leq \sum_{k=1}^n \mu_k(E_{\mu_k} - E_{\mu_{k-1}})$$

El término del medio es igual a  $A(E_{\mu_n} - E_{\mu_0}) = A$ . Si además la norma de la partición (el máximo de la distancia entre dos elementos consecutivos de la misma) es menor que un  $\varepsilon > 0$  dado, la diferencia entre los términos extremos de la desigualdad está acotada por  $\varepsilon Id$ . Entonces, si para cada  $k$  elegimos  $\lambda_k \in [\mu_{k-1}, \mu_k]$ , se tiene que

$$\|A - \sum_{k=1}^n \lambda_k(E_{\mu_k} - E_{\mu_{k-1}})\| < \varepsilon,$$

esto es, que si incrementamos el número de elementos de la partición  $(n)$  de forma que la norma de la misma tienda a 0, las sumas  $\sum_{k=1}^n \lambda_k(E_{\mu_k} - E_{\mu_{k-1}})$  convergerán en norma al operador  $A$ . Como este límite es el mismo que da origen a la definición de la integral de Riemman-Stieltjes, escribimos por analogía

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE_\lambda = \int_{m-0}^M \lambda dE_\lambda$$

, donde la segunda identidad es cierta al ser  $E_\lambda$  constante por debajo de  $m$  y por encima de  $M$ . Dicha identidad se interpreta como que para un elemento  $f \in D(A)$ ,

$$Af = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE_\lambda f$$

Por las propiedades de la familia espectral, y repitiendo las cuentas ya hechas, es fácil comprobar que

$$\forall r \in \mathbb{N}, A^r = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^r dE_\lambda$$

y por linealidad que

$$\forall p \in \mathbb{C}[X], p(A) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(\lambda) dE_\lambda$$

Finalmente, un argumento de densidad nos permite concluir que

$$\forall u \text{ continua}, u(A) = \int_{-\infty}^{+\infty} u(\lambda) dE_\lambda$$

Hasta la primera de las identidades integrales dadas es la demostración del Teorema Espectral para operadores simétricos acotados.

### 5.1.1. El Teorema Espectral para operadores autoadjuntos no acotados

Para la demostración que daremos del teorema, la dada por Von Neumann, necesitamos dos resultados previos. Uno de ellos es el teorema espectral para operadores unitarios (isometrías sobreyectivas globalmente definidas), que no demostraremos.

**Teorema 5.1.1** (*Teorema Espectral para operadores unitarios*) Sea  $V$  un operador unitario en un espacio de Hilbert complejo. Entonces,

$$V = \int_0^{2\pi} e^{i\varphi} dF_\varphi$$

con  $F_0 = 0$ ,  $F_{2\pi} = I$ .

**Demostración:** Ver ([26]). ■

El segundo es un lema de caracter técnico, que en cierto modo es un recíproco del Teorema Espectral.

**Lema 5.1.1** *Sea  $\mathcal{L}_n$  una familia numerable de subespacios de un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$  tal que  $\mathcal{H}$  descompone como suma ortogonal de todos ellos. Para cada  $n$ , consideremos un operador*

$$A_n : \mathcal{L}_n \longrightarrow \mathcal{L}_n$$

*que sea acotado y autoadjunto. Entonces, existe un único operador autoadjunto (no necesariamente acotado)*

$$A : D(A) \subset \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H} / A|_{\mathcal{L}_n} = A_n$$

*Además, dicho operador viene dado por:*

$$D(A) := \{f \in \mathcal{H} / \sum_{n=1}^{\infty} \|A_n f_n\|^2 < \infty\}; f \in D(A), Af := \sum_{n=1}^{\infty} A_n f_n$$

*donde por  $f_n$  se denota a la proyección del elemento  $f$  al subespacio  $\mathcal{L}_n$ .*

**Demostración:** De forma natural, la extensión y su dominio de definición, de existir, deben de ser los dados en el enunciado. Llamamos  $A$  y  $D(A)$  a éstos.

- $A$  es lineal.

Trivial a partir de la definición.

- $D(A)$  es denso en  $\mathcal{H}$ .

Por construcción,  $D(A)$  contiene a todos los elementos de la forma  $\sum_{k=1}^n f_k$ , con  $f_k \in \mathcal{L}_k$ . Como  $\mathcal{H}$  descompone como suma ortogonal de los  $\mathcal{L}_n$ , se concluye que  $D(A)$  es denso.

- $A$  simétrico.

Sean  $f, g \in D(A)$ . Entonces,

$$\begin{aligned} \langle Af, g \rangle &= \sum_n \langle A_n f_n, g \rangle = \sum_n \langle A_n f_n, g_n \rangle = \\ &= \sum_n \langle f_n, A_n g_n \rangle = \sum_n \langle f, A_n g_n \rangle = \\ &= \langle f, Ag \rangle \end{aligned}$$

- Sea  $g \in D(A^*)$  ( $\langle Af, g \rangle = \langle f, Ag \rangle, \forall f \in D(A)$ ). Es claro que para cada  $n$  se tiene la identidad  $(A_n)^* = (A^*)_n$ , donde la segunda es la restricción de  $A^*$  a  $\mathcal{L}_n$ . Entonces,

$$\sum \|A_n g_n\|^2 = \sum \langle A_n g_n, A_n g_n \rangle = \sum \langle (A^* g)_n, (A^* g)_n \rangle = \|A^* g\|^2 < \infty$$

De donde concluimos que  $g \in D(A)$ , y por tanto que  $A$  es autoadjunto.

- Unicidad de la extensión.

Sea  $A'$  otro operador autoadjunto tal que  $A'|_{\mathcal{L}_n} = A_n, \forall n$ . Como es autoadjunto, es cerrado, y por tanto  $A'$  está definido para todo elemento  $f / \sum A'f$  converge, y para tales elementos,  $A'f = \sum A'f_n = \sum A_n f_n$ . De aquí es obvio que  $A'$  es una extensión simétrica de  $A$ , y como  $A$  es autoadjunto (en particular, no admite extensiones simétricas propias), concluimos que  $A = A'$ .

■

Con ambos, podemos demostrar ya el Teorema Espectral. Sea  $A$  un operador autoadjunto en un espacio de Hilbert complejo  $H$ . Sabemos ya, por el criterio básico, que  $\text{Ker}(A \pm i) = 0$ ,  $\text{Ran}(A \pm i) = H$ . Pero además de las cuentas hechas para demostrarlo obtenemos, primero, que  $(A \pm i)^{-1}$  son continuas y están globalmente definidas, y la identidad  $\|(A + i)f\| = \|(A - i)f\|$ . De la segunda se tiene que el operador  $V := (A - i)(A + i)^{-1}$ , la transformada de Cayley de  $A$ , es una isometría. Además, de la definición se tiene que para los elementos de la forma

$$g = (A + i)f; Vg = (A - i)f$$

. Como  $A + i, A - i$  son ambas sobreyectivas, se tiene que tanto  $g$  como  $Vg$  varían en todo  $H$ , de donde es inmediato que  $V$  está definida globalmente y es sobreyectiva, esto es,  $V$  es unitaria, y es susceptible de aplicarle el Teorema Espectral correspondiente. Pero además podemos recuperar  $A$  a partir de  $V$ . Volvemos a las dos igualdades anteriores, y las sumamos y restamos, quedando:

$$(I + V)g = 2Af; (I - V)g = 2if$$

De la segunda ecuación, tenemos que  $I - V$  es inyectiva (y, en algún sitio, existe su inversa), que junto con la primera ecuación nos da, por sustitución directa,

$$A = i(I + V)(I - V)^{-1}$$

Como  $V$  es un operador unitario, le aplicamos su Teorema Espectral correspondiente,

$$V = \int_0^{2\pi} e^{i\varphi} dF_\varphi$$

, con  $F_0 = 0, F_{2\pi} = I$ .

- $F_\varphi$  es continua en  $\varphi = 0$ , por las propiedades de familia espectral.
- $F_\varphi$  es continua en  $\varphi = 2\pi$ , porque si no lo fuera  $1 = e^{2\pi i}$  sería valor característico de  $V$ , y en particular no existiría  $(I - V)^{-1}$ , que sabemos existe.

Consideremos  $\{\varphi_n\}_{n \in \mathbb{Z}}$  la partición de  $]0, 2\pi[$  dada por  $-\cot \frac{\varphi_n}{2} = n$ . Como  $\{F_\varphi\}$  es una familia espectral, los operadores  $P_n := F_{\varphi_n} - F_{\varphi_{n-1}}$  son proyecciones ortogonales dos a dos, y  $\sum P_n = F_{2\pi} - F_0 = I - 0 = I$ . Si llamamos  $\mathcal{L}_n := P_n H$ , entonces  $H$  descompone como la suma ortogonal de los subespacios  $\mathcal{L}_n$ . Además, como las proyecciones  $P_n$  conmutan con  $V$ , éstas permutan con  $A$  (puesto que  $A$  es una "función" de  $V$ )  $\Rightarrow P_n A = A P_n \Rightarrow A|_{\mathcal{L}_n} : \mathcal{L}_n \rightarrow \mathcal{L}_n$  (esto es, los subespacios  $\mathcal{L}_n$  son  $A$ -invariantes). Fijamos ahora  $m$ . La función  $\varphi \mapsto (1 - e^{i\varphi})^{-1}$  está acotada para  $\varphi \in [\varphi_{m-1}, \varphi_m]$ . Si cogemos  $f \in \mathcal{L}_m$ ,

$$\begin{aligned} Af &= AP_m f = i(I + V)(I - V)^{-1} P_m f = \int_{\varphi_{m-1}}^{\varphi_m} i(1 + e^{i\varphi})(1 - e^{i\varphi})^{-1} dF_\varphi = \\ &= \int_{\varphi_{m-1}}^{\varphi_m} -\cot \frac{\varphi}{2} dF_\varphi = \{\lambda = -\cot \frac{\varphi}{2}\} = \int_{m-1}^m \lambda dE_\lambda \end{aligned}$$

Obviamente,  $\{E_\lambda\}_{\lambda \in \mathbb{R}}$  es una familia espectral para  $A$  (tomando  $E_\lambda := F_a$ ). Tenemos ahora la siguiente familia de operadores:

$$\forall m, \mathcal{J}_m : \mathcal{L}_m \rightarrow \mathcal{L}_m / \mathcal{J}_m f := \int_{m-1}^m \lambda dE_\lambda$$

todos acotados y autoadjuntos, que además verifican la condición de que  $H$  descompone como suma ortogonal de todos los  $\mathcal{L}_m$ . Por el lema, existe una única extensión autoadjunta que descompone en los operadores dados,  $\mathcal{J}$ . Definimos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE_\lambda := \mathcal{J}$$

Finalmente, como  $\mathcal{L}_m = H_m$  y  $\mathcal{J}_m = A|_{\mathcal{L}_m}$ , por unicidad se tiene

$$A = \mathcal{J} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE_\lambda$$

Así, hemos demostrado el Teorema Espectral para operadores autoadjuntos no necesariamente acotados:

**Teorema 5.1.2** *Teorema Espectral* Sea  $H$  un espacio de Hilbert complejo,  $A : D(A) \subset H \rightarrow H$  un operador autoadjunto. Entonces,

$$A = \mathcal{J} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE_\lambda$$

## 5.2. Caracterización de operadores autoadjuntos

Sea un operador  $A : D(A) \subset H \rightarrow H$  densamente definido en un espacio de Hilbert  $H$ . En esta sección estudiamos la caracterización de operadores autoadjuntos, para luego mostrar

un ejemplo de un operador simétrico pero no autoadjunto.

Definimos el conjunto

$$D(A^*) = \{\psi \in H \mid \exists \psi^* \in H \text{ tal que } \langle A\varphi, \psi \rangle_H = \langle \varphi, \psi^* \rangle_H \text{ para toda } \varphi \in D(A)\}.$$

Para cada  $\psi \in D(A)$ , el elemento  $\psi^*$  es único. En efecto, si  $\langle A\varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, \psi_1^* \rangle$  y  $\langle A\varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, \psi_2^* \rangle$ , para toda  $\varphi \in D(A)$ . Entonces

$$\langle \varphi, \psi_1^* - \psi_2^* \rangle = 0, \quad \varphi \in D(A).$$

Desde que  $D(A)$  es un subespacio denso de  $H$ , se sigue que  $\psi_1^* = \psi_2^*$ . Por lo tanto, la aplicación  $A^* : D(A^*) \subset H \rightarrow H$  dada por  $A^*\psi = \psi^*$ , está bien definida.

**Definición 5.2.1** Sea un operador  $A : D(A) \subset H \rightarrow H$  densamente definido en un espacio de Hilbert  $H$ . El operador  $A^*$  se llama **dual** de  $A$ .

### 5.2.1. Operadores simétrico y autoadjunto. Criterios

**Definición 5.2.2** Un operador  $A$ , densamente definido en un espacio de Hilbert  $H$  se llama **simétrico** si  $A \subset A^*$ , es decir, si  $D(A) \subset D(A^*)$  y  $A\psi = A^*\psi$  para toda  $\psi \in D(A)$ .

**Definición 5.2.3** Un operador  $A$  es llamado **autoadjunto** si  $A = A^*$ , es decir, si  $A$  es simétrico y  $D(A) = D(A^*)$ .

**Definición 5.2.4** Un operador  $A : D(A) \subset H \rightarrow H$  se dice **cerrado**, si el conjunto

$$\Gamma(A) = \{(\varphi, A\varphi) \in H \times H \mid \varphi \in D(A)\} \subset H \times H$$

es un subconjunto cerrado en  $H \times H$ .

**Lema 5.2.1** Sea  $A$  un operador simétrico en un espacio de Hilbert  $H$ . Entonces,  $A^*$  es cerrado, es decir, el gráfico de  $A$ ,  $\Gamma(A)$ , es un subespacio cerrado de  $H \times H$ .

**Demostración:** Definimos el operador unitario  $V : H \times H \rightarrow H \times H$  como

$$V(\varphi, \psi) = (-\psi, \varphi).$$

El producto interno en  $H \times H$  es dado por

$$\langle (\varphi_1, \psi_1), (\varphi_2, \psi_2) \rangle_{H \times H} = \langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle_H + \langle \psi_1, \psi_2 \rangle_H.$$

A continuación, mostramos que  $V[\Gamma(A)]^\perp = \Gamma(A^*)$ . En efecto,

$$\begin{aligned}
 (\varphi, \psi) \in (V[\Gamma(A)])^\perp &\Leftrightarrow \langle (\varphi, \psi), V(\omega, A\omega) \rangle_{H \times H} = 0 && , \text{ para toda } \omega \in D(A) \\
 &\Leftrightarrow \langle (\varphi, \psi), (-A\omega, \omega) \rangle_{H \times H} = 0 && , \text{ para toda } \omega \in D(A) \\
 &\Leftrightarrow \langle \psi, \omega \rangle_H = \langle \varphi, A\omega \rangle_H && , \text{ para toda } \omega \in D(A) \\
 &\Leftrightarrow \langle \omega, \psi \rangle_H = \langle A\omega, \varphi \rangle_H = \langle \omega, A^*\varphi \rangle_H && , \text{ para toda } \omega \in D(A) \\
 &\Leftrightarrow \psi = A^*\varphi \\
 &\Leftrightarrow (\varphi, \psi) = (\varphi, A^*\varphi) \in \Gamma(A^*),
 \end{aligned}$$

y desde que todo subespacio ortogonal es cerrado, se sigue que  $\Gamma(A^*)$  es un subespacio cerrado en  $H$ . Concluimos que  $A$  es cerrado. ■

**Teorema 5.2.1** *Sea  $A$  un operador simétrico en un espacio de Hilbert  $H$ . Son equivalentes:*

- a.  $A$  es autoadjunto.
- b.  $A$  es cerrado y  $\ker(A^* \pm i) = \{0\}$ .
- c.  $\text{Ran}(A \pm i) = H$ .

**Demostración:**

- a)  $\rightarrow$  b). Supongamos que  $A$  es autoadjunto. En particular, por el lema 5.2.1, es un operador cerrado. Por otro lado, sea  $\varphi \in \ker(A^* \pm i)$ , entonces

$$\pm i \langle \varphi, \varphi \rangle = \langle \varphi, \mp i \varphi \rangle = \langle \varphi, A^* \varphi \rangle = \langle \varphi, A \varphi \rangle = -\langle A \varphi, \varphi \rangle = -\langle \varphi, A^* \varphi \rangle = \mp i \langle \varphi, \varphi \rangle,$$

entonces  $\varphi = 0$ . Luego,  $\ker(A^* \pm i) = \{0\}$ .

- b)  $\rightarrow$  c) Esta parte de la demostración está basada en mostrar que el conjunto  $\text{Ran}(A \pm i)$  es denso y cerrado en  $H$ . Para la densidad, sea  $\psi \in (\text{Ran}(A \pm i))^\perp$ , entonces

$$\langle (A \pm i)\varphi, \psi \rangle = 0 \quad , \quad \text{para toda } \varphi \in D(A).$$

Entonces

$$0 = \langle (A \pm i)\varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, (A^* \mp i)\psi \rangle \quad , \quad \text{para toda } \varphi \in D(A),$$

y desde que  $D(A)$  es denso en  $H$ ,  $\psi \in \ker(A^* \pm i) = \{0\}$ . Entonces  $\psi = 0$ , por lo tanto  $\text{Ran}(A \pm i)$  es denso en  $H$ .

Ahora, mostramos que el conjunto  $Ran(A \pm i)$  es cerrado en  $H$ . En efecto, sea  $\varphi_n \in D(A)$  tal que  $\lim_{n \rightarrow \infty} (A \pm i)\varphi_n = \psi$ . Por ser  $A$  un operador simétrico, se cumple que  $\langle \varphi_n, A\varphi_n \rangle \in \mathbb{R}$ . Por lo cual, se cumple la igualdad

$$\|(A \pm i)\varphi_n\|^2 = \|A\varphi_n\|^2 + \|\varphi_n\|^2.$$

Entonces, las sucesiones  $(A\varphi_n)_{n \in \mathbb{N}}$  y  $(\varphi_n)_{n \in \mathbb{N}}$  son de Cauchy. Por ser  $A$  cerrado, existe  $\varphi \in D(A)$  tal que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_n = \varphi, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} A\varphi_n = A\varphi.$$

Entonces

$$\psi = \lim_{n \rightarrow \infty} (A \pm i)\varphi_n = \lim_{n \rightarrow \infty} A\varphi_n \pm i \lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_n = A\varphi \pm i\varphi = (A \pm i)\varphi.$$

Así,  $\psi \in Ran(A \pm i)$ , es decir,  $Ran(A \pm i)$  es cerrado en  $H$ . Finalmente, obtenemos

$$Ran(A \pm i) = \overline{Ran(A \pm i)} = H.$$

- $c) \rightarrow a)$ . La parte principal de la prueba radica en mostrar que  $\ker(A^* \pm i) = \{0\}$ . En efecto, sea  $\varphi \in \ker(A^* \pm i)$ , entonces

$$\langle (A \mp i)\psi, \varphi \rangle = \langle \psi, (A^* \pm i)\varphi \rangle = 0, \quad \text{para toda } \psi \in D(A).$$

Entonces  $\varphi = 0$ , ya que por hipótesis  $Ran(A \pm i) = H$ .

Ahora, sea  $\psi \in D(A^*)$ , entonces  $(A^* \pm i)\psi \in H$ , por hipótesis, existe un  $\varphi \in D(A)$  tal que

$$(A^* \pm i)\psi = (A \pm i)\varphi.$$

Por ser  $A$  un operador simétrico,  $\varphi \in D(A^*)$ , entonces

$$(A^* \pm i)(\psi - \varphi) = 0,$$

así,  $\psi - \varphi \in \ker(A^* \pm i) = \{0\}$ . Entonces,  $\psi = \varphi \in D(A)$  y  $D(A^*) \subset D(A)$ . Concluimos que  $A$  es autoadjunto.

■

**Observación 11 (Funciones absolutamente continuas)** Una función  $F : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  se llama **absolutamente continua** si para todo  $\epsilon > 0$ , existe un  $\delta > 0$  tal que para toda familia  $\{(a_i, b_i)\}$  de intervalos disjuntos en  $[a, b]$  tal que  $\sum_{i=1}^n (b_i - a_i) < \delta$ , se cumple

$$\sum_{i=1}^n |F(b_i) - F(a_i)| < \epsilon.$$

Denotamos por  $AC[a, b]$  el conjunto de las funciones absolutamente continuas en  $[a, b]$ . A continuación enumeramos algunas propiedades de conjunto  $AC[a, b]$ , las cuales usaremos más adelante.

- $AC[a, b]$  es un espacio vectorial.
- $AC[a, b] \subset C([a, b])$ .
- Si  $F \in AC[a, b]$ , entonces  $F$  es derivable c.t.p.
- Sea  $f \in L^1(a, b)$ , definimos  $F(x) = \int_a^x f(t)dt$ . Entonces  $F \in AC[a, b]$ .
- Si  $F \in AC[a, b]$ , entonces  $F(x) = F(a) + \int_a^x F'(t)dt$ .
- Si  $F \in AC[a, b]$ , entonces  $F$  es acotada en  $[a, b]$ .

### 5.2.2. Ejemplo. Operador simétrico pero no autoadjunto

Sea el operador  $T : D(T) \rightarrow L^2(0, 1)$ , definido por  $Tf = i \frac{d}{dx}f$ , donde

$$D(T) = \{f \in AC[0, 1] \mid f(0) = 0 = f(1), \frac{d}{dx}f \in L^2(0, 1)\}.$$

A continuación mostramos algunas propiedades del operador  $T$ .

1.  $T$  es simétrico. En efecto, sean  $f, g \in D(T)$  y por integración por partes

$$\langle Tf, g \rangle - \langle f, Tg \rangle = \int_0^1 Tf\bar{g} - \int_0^1 f\overline{Tg} = i \int_0^1 f'\bar{g} + i \int_0^1 f\bar{g}' = i(f\bar{g})|_0^1 = 0.$$

2.  $T$  es cerrado. En efecto, sea  $(f_n) \in L^2(0, 1)$  tal que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_n = f, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} Tf_n = g. \quad (5.1)$$

La convergencia es en norma  $L^2(0, 1)$ . Entonces

$$if(x) = i \lim_{n \rightarrow \infty} f_n = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^x if'_n(t)dt = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^x Tf_n = \int_0^x g(t)dt.$$

Así,  $Tf = g$ . Además, de la ecuación (5.1):  $f(0) = 0 = f(1)$ . Por lo cual,  $f \in D(T)$ .

3. Se sabe que el conjunto  $D(T)$  es denso en  $L^2(0, 1)$ . Por lo tanto, el operador  $T^*$  está bien definido.

Ahora calculamos el operador  $T^*$ . Para ello, por definición, debemos encontrar todas las funciones  $g, g^* \in L^2(0, 1)$  tal que

$$\int_0^1 i f' \bar{g} = \langle T f, g \rangle = \langle f, g^* \rangle = \int_0^1 f \bar{g^*}, \quad f \in D(T). \quad (5.2)$$

Sea  $g^{**}(x) = \int_0^x g^*(t) dt$ , la integral está bien definida ya que  $g^* \in L^2(0, 1)$  y  $x \in [0, 1]$ . Luego, por integración por partes y de la ecuación (5.2), tenemos

$$\int_0^1 i f' \bar{g} = \int_0^1 f \bar{g^*} = \int_0^1 f \overline{g^{**'}} = - \int_0^1 f' \overline{g^{**}}, \quad f \in D(T).$$

De lo cual, se obtiene la siguiente identidad

$$0 = \int_0^1 f' (\overline{g + i g^{**}}) = \int_0^1 f' \bar{h}, \quad f \in D(T), \quad (5.3)$$

donde  $h(x) = g(x) + i g^{**}(x)$ . Sea  $c = \int_0^1 h(t) dt$ , entonces

$$\|h - c\|_{L^2(0,1)}^2 = \int_0^1 (h - c) (\overline{h - c}) = \int_0^1 (h - c) \bar{h} - \int_0^1 (h - c) \bar{c} = \int_0^1 (h - c) \bar{h} \quad (5.4)$$

Consideramos la función  $f(x) = \int_0^x h(t) dt - cx$ . Es claro que  $f \in D(T)$ , además  $f'(x) = h(x) - c$ . Por lo tanto, de las ecuaciones (5.3) y 85.4), se tiene

$$\|h - c\|_{L^2(0,1)}^2 = \int_0^1 (h - c) \bar{h} = \int_0^1 f' \bar{h} = 0.$$

Entonces

$$h(x) = g(x) + i g^{**}(x) = c, \quad \text{c.t.p } x \in [0, 1].$$

Derivando ambos miembros de la igualdad, se tiene que  $g' + i g^* = 0$ . Por lo tanto,  $T^* g = g^* = i g'$ .

Concluimos que el operador  $T^* : D(T^*) \rightarrow L^2(0, 1)$ , está definido por  $T^* = i \frac{d}{dx}$ , donde

$$D(T^*) = \{g \in AC[0, 1] \mid \frac{d}{dx} g \in L^2(0, 1)\}.$$

El operador  $T^*$  es una extensión autoadjunta propia de  $T$ , ya que su dominio no posee restricciones. En particular,  $T$  no es autoadjunto.

### 5.3. El Teorema del Cauchy-Kowalevski

En esta sección demostramos una versión simplificada del teorema de Cauchy-Kowalevski, que en el caso más general, establece la existencia y unicidad de soluciones locales para el problema de Cauchy asociado a ciertas ecuaciones en derivadas parciales.

Las referencias empleadas en éste capítulo son [20] y [19].

### 5.3.1. Notación

Recordamos brevemente la notación multiíndice introducida por Laurent Schwartz.

Sea  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$  una n-tupla con  $\alpha_i \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ , dada una función  $f : \Omega \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  con las condiciones necesarias de regularidad, denotamos

$$\partial^\alpha f = \partial_1^{\alpha_1} \cdots \partial_n^{\alpha_n} f,$$

donde  $\partial_i$  es el i-ésimo operador de derivación; es decir,  $\partial_i f(x) = \frac{\partial f}{\partial x_i}(x)$ .

De forma similar, definimos la potencia  $\alpha$ -ésima de un vector  $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$  como el monomio

$$x^\alpha = x_1^{\alpha_1} \cdots x_n^{\alpha_n}.$$

Definiremos también la **longitud** y el **factorial** de un multiíndice  $\alpha$  respectivamente como:

$$|\alpha| = \alpha_1 + \cdots + \alpha_n, \quad \forall \alpha.$$

y

$$\alpha! = \alpha_1! \cdots \alpha_n!.$$

Será útil también definir un orden en el conjunto de multiíndices de la siguiente manera:  $\alpha \geq \beta$  si y sólo si  $\alpha_j \geq \beta_j \quad \forall j$ .

### 5.3.2. Funciones analíticas de variable real

Sea  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  un conjunto abierto, diremos que una función  $f : \Omega \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  es **analítica de variable real** (o más brevemente, real analítica) en  $y \in \Omega$  si existe un entorno abierto  $N_y$  de  $y$  tal que

$$f(x) = \sum_{\alpha \geq 0} c_\alpha (x - y)^\alpha, \quad \forall x \in N_y.$$

Diremos que  $f$  es real analítica en  $\Omega$  si es real analítica en todo  $y \in \Omega$ ; denotamos por  $C^\omega(\Omega)$  el conjunto de todas las funciones analíticas de variable real en  $\Omega$ .

**Observación 12** *Para que la serie esté bien definida -el teorema de Fubini-Tonelli juega aquí un papel-, la serie debe ser absolutamente convergente. Así, siempre que hablemos de convergencia puntual, estaremos refiriéndonos a convergencia absoluta. De hecho, en la siguiente proposición probaremos que la convergencia de tales series es uniforme en un cierto abierto.*

**Proposición 5.3.1** *Sea  $f \in C^\omega(\Omega)$ , entonces  $f \in C^\infty(\Omega)$ . Además, para cada  $y \in \Omega$  existen un entorno abierto  $N_y$  y números positivos  $M$  y  $r$  tales que para cualquier  $x \in N_y$  se verifican:*

a)

$$f(x) = \sum_{\alpha \geq 0} \frac{1}{\alpha!} \partial^\alpha f(y) (x - y)^\alpha \text{ uniformemente en } N_y,$$

b)

$$|\partial^\alpha f(x)| \leq M |\alpha|! r^{-|\alpha|}, \quad \forall \alpha.$$

**Demostración:** Asumiremos que  $y = 0$ , ya que la prueba es invariante por traslaciones en  $\mathbb{R}^n$ .

Consideremos un entorno abierto  $N$  del origen de coordenadas y un  $z \in N$  tal que  $z_i \neq 0 \forall i$ . De acuerdo con la noción de convergencia que hemos fijado en la observación anterior, es claro que

$$\mu := \sum_{\alpha} |c_{\alpha}| |z^{\alpha}| < \infty,$$

lo que significa que  $\sum_{\alpha} c_{\alpha} x^{\alpha}$  converge para cada  $x$  tal que  $|x_i| \leq |z_i| \forall i$ . En virtud del criterio M de Weierstrass, la convergencia es uniforme en

$$\{x : |x_i| \leq |z_i| \forall i\}.$$

El conjunto abierto  $\Omega = \{x : |x_i| \leq |z_i| \forall i\}$  es no vacío porque el  $z$  elegido verifica  $z_i \neq 0 \forall i$ . Sea ahora  $A$  un abierto que verifique  $\overline{A} \subseteq \Omega$ , entonces existe un  $q \in (0, 1)$  tal que  $|x_i| \leq q|z_i| \forall i, \forall x \in A$ .

Afirmamos ahora que, si  $|x_i| < 1 \forall i$ , entonces

$$\frac{\beta!}{(1-x)^{1+\beta}} = \partial^\beta \frac{1}{(1-x)^1} = \sum_{\alpha \geq \beta} \frac{\alpha!}{(\alpha-\beta)!} x^{\alpha-\beta},$$

donde el número 1 que aparece en los exponentes debe ser entendido como el multiíndice  $(1, \dots, 1)$ .

Para la prueba de estas fórmulas, indicamos la referencia [20], donde pueden consultarse las identidades necesarias -algunas de ellas disponibles como ejercicios- y propiedades que verifican las funciones analíticas de variable real; así como su relación con las funciones analíticas de variable compleja.

Las anteriores identidades, cuando  $x \in A$  dan lugar a

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} |\partial^\beta c_{\alpha} x^{\alpha}| &= \sum_{\alpha \geq \beta} |c_{\alpha}| \frac{\alpha!}{(\alpha-\beta)!} |x^{\alpha-\beta}| \\ &\leq \sum_{\alpha \geq \beta} |c_{\alpha}| \frac{\alpha!}{(\alpha-\beta)!} q^{|\alpha-\beta|} |z^{\alpha-\beta}| \\ &\leq \frac{\mu}{|z^{\beta}|} \sum_{\alpha \geq \beta} \frac{\alpha!}{(\alpha-\beta)!} q^{|\alpha-\beta|} \end{aligned}$$

$$= \frac{\mu}{|z^\beta|} \frac{\beta!}{(1-q)^{n+|\beta|}} < \infty \quad (q \in (0, 1)).$$

Lo que hemos demostrado es que la serie de potencias formal  $\sum_\alpha \partial^\beta c_\alpha x^\alpha$  de hecho converge uniformemente en  $A$  para cualquier multiíndice  $\beta$ . Así, por un resultado bien conocido sobre series de funciones, la función  $f$  definida por la serie

$$f(x) = \sum_\alpha c_\alpha x^\alpha$$

es una función indefinidamente derivable en el conjunto  $A$ .

Simplemente definiendo  $M = \frac{\mu}{(1-q)^n}$  y  $r = (1-q) \min_i |z_i|$ , obtenemos las desigualdades

$$|\partial^\beta f(x)| \leq M |\beta|! r^{-|\beta|}$$

en  $A$ .

Ahora, mediante una derivación término a término -que ahora está justificada rigurosamente- se ve que

$$c_\alpha = \frac{1}{\alpha!} \partial^\alpha f(0);$$

que es justo lo que queríamos demostrar. ■

Igual que las funciones analíticas de variable compleja, las funciones analíticas de variable real verifican una propiedad de continuación única.

**Proposición 5.3.2** *Sea  $f \in C^\omega(\Omega)$ , siendo  $\Omega$  un abierto conexo. Sea  $x \in \Omega$  tal que  $\partial^\alpha f(x) = 0$  para cualquier  $\alpha \in (\mathbb{N} \cup \{0\})^n$ , entonces  $f(x) = 0$  para cualquier  $x \in \Omega$ .*

**Demostración:** Definimos los conjuntos  $\Omega_1 = \{x \in \Omega : \partial^\alpha f(x) = 0 \forall \alpha\}$  y  $\Omega_2 = \Omega \setminus \Omega_1$ . El conjunto  $\Omega_1$  es abierto, luego también lo es  $\Omega_2$ ; y por un argumento de conectividad se deduce que  $\Omega = \Omega_1$ . ■

El siguiente teorema da una caracterización de las funciones  $C^\infty(\Omega)$  que son reales-analíticas en términos de una acotación sobre cómo crecen las derivadas de una función en un punto conforme aumenta el orden de derivación.

**Teorema 5.3.1** *Sea  $f : \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ , entonces es equivalente:*

a)  $f \in C^\omega(\Omega)$ ,

b)  $f \in C^\infty(\Omega)$  y para cualquier compacto  $S \subseteq \Omega$  podemos encontrar números  $M$  y  $r$  positivos tales que

$$|\partial^\alpha f(y)| \leq M |\alpha|! r^{-|\alpha|}, \quad \forall \alpha, \forall y \in S.$$

**Demostración:** Por la compacidad de  $S$ , escribimos  $S$  como una unión finita de abiertos  $U_i$  en los que tenemos la acotación con unos  $r_i$  y  $M_i$  distintos en cada  $U_i$ ; tomando el máximo de los  $M_i$  y el mínimos de los  $r_i$  tenemos la acotación en todo el compacto  $S$ .

Para probar la afirmación recíproca definimos la función  $\phi(t) = f(y + t(x - y))$ . Dado  $y \in \Omega$ , tomamos un número  $s$  suficientemente pequeño para que el compacto

$$S = \{x : |x - y| \leq s\}$$

esté contenido en  $\Omega$ ; de modo que  $y + t(x - y) \in S$  si  $t \in (0, 1)$  y  $x \in S$ , luego  $\phi$  es indefinidamente derivable en  $(0, 1)$ . Además, las derivadas de  $\phi$  se calculan según

$$\frac{1}{j!} \phi^{(j)}(t) = \sum_{|\alpha|=j} \frac{1}{\alpha!} \partial^\alpha f(y + t(x - y)) (x - y)^\alpha,$$

obtenemos la siguiente acotación

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{j!} \phi^{(j)}(t) \right| &= \left| \sum_{|\alpha|=j} \frac{1}{\alpha!} \partial^\alpha f(y + t(x - y)) (x - y)^\alpha \right| \\ &\leq \sum_{|\alpha|=j} \frac{1}{\alpha!} M |\alpha|! r^{-|\alpha|} |(x - y)^\alpha| \\ &\leq M \sum_{|\alpha|=j} \frac{|\alpha|!}{\alpha!} r^{-|\alpha|} |(x - y)^\alpha| \\ &= \frac{M}{r^j} (|x_1 - y_1| + \cdots + |x_n - y_n|)^j \\ &= M \left( \frac{d}{r} \right)^j; \end{aligned}$$

siendo  $d = |x_1 - y_1| + \cdots + |x_n - y_n|$ .

Usando el desarrollo de Taylor con resto integral  $r_j$ , representamos  $f(x)$  como

$$f(x) = \phi(1) = \sum_{k=0}^{j-1} \frac{1}{k!} \phi^{(k)}(0) + r_j.$$

Podemos estudiar ahora el comportamiento del resto  $r_j$ :

$$\begin{aligned} |r_j| &= \left| \frac{1}{(j-1)!} \int_0^1 (1-t)^{j-1} \phi^{(j)}(t) dt \right| \\ &\leq M \left( \frac{d}{r} \right)^j \frac{j!}{(j-1)!} \int_0^1 (1-t)^{j-1} dt \\ &= M \left( \frac{d}{r} \right)^j j \int_0^1 (1-t)^{j-1} dt \end{aligned}$$

$$= M \left( \frac{d}{r} \right)^j,$$

expresión que tiende a 0 si  $d = |x_1 - y_1| + \cdots + |x_n - y_n| < r$ . En consecuencia, la serie de potencias de  $f$  alrededor de  $y$  converge si

$$|x_1 - y_1| + \cdots + |x_n - y_n| < \min\{r, s\}.$$

**Observación 13** Si definimos la función  $\phi(x) = \frac{Mr}{r - x_1 - \cdots - x_n}$ , se comprueba que

$$|\partial^\alpha f(0)| \leq M|\alpha|!r^{-|\alpha|} \Leftrightarrow |\partial^\alpha f(0)| \leq \partial^\alpha \phi(0).$$

Cuando se verifican estas condiciones se dice que  $\phi$  **mayora** a  $f$  y se denota por  $f \ll \phi$ . Si además  $f(0) = 0$ , entonces  $f \ll \phi - M$ , y viceversa.

### 5.3.3. Teorema de Cauchy-Kowalesvki

El problema de Cauchy más general consiste en encontrar una función  $u : \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^d$  que verifique una ecuación de orden  $m$  de la forma

$$F(x, u, (\partial^\alpha u)_{|\alpha| \leq m}) = 0,$$

y que además los valores de  $u$  y los de las derivadas normales  $\partial_\nu^k u$  ( $k \leq m-1$ ) vengan prescritos sobre una hipersuperficie  $S$  de  $\mathbb{R}^n$ . Los valores de  $u$  y sus derivadas que prescribimos sobre  $S$  se denominan datos de Cauchy. Aquí consideraremos el problema de Cauchy cuando la función  $F$  y la hipersuperficie  $S$  son analíticas; más aún, supondremos que los datos de Cauchy son analíticos sobre la hipersuperficie  $S$ .

El teorema de Cauchy-Kowalevski afirma que bajo las condiciones de analiticidad que hemos fijado, el problema de Cauchy planteado tiene una única solución analítica alrededor de cualquier punto  $x \in S$  cuando  $S$  es una hipersuperficie no característica para la ecuación dada. En este caso se dice que el problema de Cauchy es no característico. Aunque no vamos a explicar aquí lo que es una superficie no característica, indicamos que esta condición expresa el hecho de que la ecuación determine sobre la hipersuperficie todas las derivadas de una solución a partir de los datos de Cauchy.

El problema de Cauchy general puede reducirse sin pérdida de generalidad al siguiente problema:

Encontrar una función  $U : \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^p$  tal que

$$\begin{cases} \partial_t U = \sum_{i=1}^{n-1} A_i(x, U) \partial_i U + B(x, U), \\ U(x, 0) = 0, \end{cases}$$

siendo  $B$  una función con valores en  $\mathbb{R}^N$  y  $A_1, \dots, A_{n-1}$  funciones matriciales  $N \times N$ ; siendo todas ellas reales-analíticas en un entorno del origen de coordenadas de  $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^N$ . En este caso, la hipersuperficie de  $\mathbb{R}^n$  sobre la que se dan los datos de Cauchy es  $\{t = 0\}$ , y según la noción de superficie característica que hemos dado antes -aunque de forma poco rigurosa-, la superficie es característica, ya que es evidente que podemos recuperar todas las derivadas de  $U$  sobre la superficie partir de los datos de Cauchy y de la ecuación.

Para hacer más clara la lectura, vamos a demostrar la existencia y unicidad de solución en el caso en que  $n = 2$  y  $N = 1$ , siendo la prueba para el caso general muy parecida. Así, enunciamos

**Teorema 5.3.2** *Dado el problema*

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) = a(x, u) \partial_x u(x, t) + b(x, u) \\ u(x, 0) = 0, \end{cases}$$

*siendo  $a$  y  $b$  funciones analíticas en un entorno del origen de  $\mathbb{R}^2$ ; existe una única solución analítica en un entorno de  $(0, 0) \in \mathbb{R}^2$ .*

**Demostración:** Supongamos que el problema tiene una solución analítica  $u$  en  $(0, 0)$  que converge en un entorno  $N$  del origen; entonces  $u \in C^\infty(N)$ , luego derivando el dato de Cauchy respecto a  $x$  tenemos que  $\partial_x^j u(x, 0) = 0$  para todo  $j \geq 0$ . De ésto se deduce que

$$\partial_t u(0, 0) = b(0, u(0, 0)) = b(0, 0).$$

Derivando la ecuación, obtenemos

$$\partial_t^k \partial_x^j u(x, t) = P_{k,j}(\partial_x^l \partial_u^m a(x, u(x, t)), \partial_x^p \partial_t^q u(x, t), \partial_x^r \partial_u^s b(x, u(x, t)));$$

siendo  $P_{k,j}$  un polinomio con coeficientes positivos, con

$$1 + l + m \leq k + j; \quad 1 + r + s \leq k + j; \quad p + q \leq k + j; \quad q + 1 \leq k.$$

Si  $k = 1$ , entonces  $q = 0$ , luego  $\partial_t \partial_x^j u(0, 0)$  depende únicamente de las derivadas de  $a$  y de  $b$ . Por inducción sobre  $k$ , se obtiene que los coeficientes  $\partial_t^k \partial_x^j u(0, 0)$  están determinados únicamente por  $a$  y  $b$ . Así, si la solución  $u$  se representa por una serie

$$u(x, t) = \sum_{k,j=0}^{\infty} \frac{\partial_t^k \partial_x^j u(0, 0)}{k!j!} t^k x^j$$

que converge en un entorno  $N$ , se deduce de la propiedad de continuación única que  $u$  es la única solución en un entorno de  $(0, 0)$ .

En caso de que exista una solución analítica alrededor del origen, ya sabemos cómo debe ser su serie de potencias; luego para establecer la existencia de solución, basta probar que dicha serie de potencias converge en un entorno del origen. La convergencia de la serie vamos a establecerla mediante el método de los mayorantes, introducido por Cauchy.

Supongamos que existe un problema

$$\begin{cases} \partial_t v(x, t) = A(x, v) \partial_x v(x, t) + B(x, v) \\ v(x, 0) = 0, \end{cases}$$

con  $A$  y  $B$  analíticas en el origen tales que

$$|\partial_x \partial_u a(0, 0)| \leq \partial_x \partial_v A(0, 0)$$

y

$$|\partial_x \partial_u b(0, 0)| \leq \partial_x \partial_v B(0, 0)$$

y supongamos que el problema tiene una solución analítica  $v$  en  $(0, 0)$ . En estas condiciones, como  $P_{k,j}$  es un polinomio con coeficientes positivos, por inducción sobre  $k$  se verifica,

$$\begin{aligned} |\partial_t^k \partial_x^j u(0, 0)| &\leq P_{k,j}(|\partial_x^j \partial_u^m a|, |\partial_x^p \partial_t^q u|, |\partial_x^l \partial_u^s b|) \\ &\leq P_{k,j}(\partial_x^j \partial_u^m A, \partial_x^p \partial_t^q v, \partial_x^l \partial_u^s B) \\ &= \partial_t^k \partial_x^j v(0, 0); \end{aligned}$$

de donde se deduce que la serie de potencias de  $u$  en  $(0, 0)$  converge al menos donde converja la serie de potencias de  $v$  centrada en el origen.

Basta entonces con encontrar un problema que mayor al problema general del enunciado. Como  $a$  y  $b$  son analíticas en  $(0, 0)$ , existen constantes  $M$  y  $r$  positivas tales que

$$|\partial_x^k \partial_v^j a(x, v)| \leq M |k + j|! r^{-(k+j)},$$

$$|\partial_x^k \partial_v^j b(x, v)| \leq M |k + j|! r^{-(k+j)};$$

lo que -por la observación hecha en la subsección anterior- es equivalente a que las funciones

$$A(x, v) = \frac{Mr}{r - x - v},$$

$$B(x, v) = \frac{Mr}{r - x - v}$$

mayoren las funciones  $a$  y  $b$  respectivamente.

Por tanto, sólo queda ver que la solución de

$$\begin{cases} \partial_t v(x, t) = A(x, v) \partial_x v(x, t) + B(x, v) \\ v(x, 0) = 0, \end{cases}$$

es analítica  $(0, 0)$ . Sustituyendo en esta ecuación las funciones mayorantes  $A$  y  $B$  que acabamos de construir, la ecuación queda

$$\begin{cases} \partial_t v(x, t) = \frac{Mr}{r-x-v}(\partial_x v + 1) \\ v(x, 0) = 0, \end{cases},$$

que es una ecuación cuasilineal de primer orden que puede resolverse explícitamente usando el método de las características, y cuya solución es

$$v(x, t) = \frac{r - x - \sqrt{(r - x)^2 - 4Mrt}}{2},$$

que claramente es analítica en  $(0, 0)$ . ■

## 5.4. Scattering de neutrones: ESS

### 5.4.1. ¿Qué es la ESS? ([www.europeanspallationsource.se](http://www.europeanspallationsource.se))

- **Centro de investigación multidisciplinar** basado en la fuente de neutrones mas potente del mundo, 30 veces mas potente que las actuales instalaciones.
- Permitirá los científicos ver y comprender las **estructuras básicas y las fuerzas atómicas** de diferentes materiales.
- Se puede comparar con un microscopio gigante para el estudio de materiales.
- Mas que una herramienta de investigación, se trata de una **organización nueva**.
- La ESS es un **proyecto Europeo**, en el que participan 17 países europeos.
- Suecia y Dinamarca con los países de acogida:
  - La **instalación** de ESS se construirá en **Lund, Suecia**.
  - La **gestión de datos ESS y Centro de Software** en **Copenague, Dinamarca**.

### 5.4.2. Dinámica de espalación o scattering de neutrones

A continuación explicaremos uno a uno los principales pasos para el estudio de la espalación de neutrones.

1. Mediante una **fuentes de iones** se producen iones de hidrógeno negativamente cargados. Cada ión contiene un protón orbitado por dos electrones.

2. Los iones se inyectan en un **acelerador lineal**, que los acelera a una energía muy alta. Los iones pasan a través de una lámina que despoja de cada ión los dos electrones, convirtiendo el ión en un protón.
3. Los protones pasan a **un anillo** donde se acumulan en grupos. Cada grupo de protones se libera del anillo como un pulso.
4. Los pulsos de protones de alta energía golpean un blanco de metal pesado, usualmente un contenedor de mercurio líquido. A este proceso se le denomina **espalación de neutrones**, en el que se liberan pulsos de neutrones.
5. Los pulsos de neutrones liberados por el proceso de espalación se desaceleran en un **moderador**.
6. Los pulsos moderados se guían a las áreas que contienen **instrumentos altamente especializados** para la realización de experimentos. Aquí es donde ocurre el proceso de **espalación ó scattering** que explicaremos en esta sección.

### 5.4.3. Propiedades básicas del neutrón

- El neutrón es una partícula nucleica con masa  $m_n = 1,675 * 10^{-27} kg$ .
- No existe naturalmente de forma libre, pero se desintegra de un protón, un electrón y un neutrino.
- La vida de un neutrón es de aproximadamente 886 segundos.
- Es eléctricamente neutro, pero contiene momento magnético.
- El neutrón interactúa con el núcleo mediante las fuertes fuerzas nucleares y con los momentos magnéticos mediante las fuerzas magnéticas.

### 5.4.4. Dualidad onda-partícula

Una de las consecuencias de la mecánica cuántica es que la materia, en particular el electrón, se puede tratar como partícula u onda. En la dispersión de neutrones, los neutrones se comportan como partículas cuando son creadas, como ondas cuando se dispersan y nuevamente como partículas cuando se detectan. Más específicamente, a una partícula moviéndose a velocidad constante  $v(m/s)$ , se le atribuye longitud de onda (de Bogle):

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv} \quad (5.5)$$

donde  $\hbar = 1,034 \cdot 10^{-34} Js$  es la constante de Plank.

En la dispersión de neutrones, la interpretación como onda se refiere en términos del número de onda del neutrón.  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ , un vector de onda de longitud  $k$  y misma dirección que la velocidad,

$$k = \frac{m_n v}{\hbar} (\text{\AA}^{-1}) \quad (5.6)$$

Para nuestro propósito consideramos el neutrón como no-relativista, por lo que su energía cinética viene dada por:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} (\text{eV}) \quad (5.7)$$

donde  $1\text{eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} J$ .

### 5.4.5. Teoría de la dispersión ó scattering

La Teoría de la Dispersión de partículas cuánticas es uno de los temas más importantes en la Mecánica Cuántica por sus múltiples aplicaciones en la Física Nuclear, en el estudio de las partículas elementales y en la caracterización de átomos, moléculas y sólidos.

Debemos recordar que las partículas cuánticas pueden ser fermiones, como los electrones, protones, neutrones; y bosones, como los diferentes tipos de fotones (Rayos X, Rayos Gammas etc.). En estas notas nos centraremos en la dispersión de fermiones, concretamente, de los neutrones.

Dentro del marco de la Teoría de la Dispersión son conocidos dos tipos de dispersión, la elástica y la inelástica; además, la magnitud fundamental que caracteriza la dispersión es conocida como la sección eficaz de dispersión.

### 5.4.6. Proceso de dispersión

Llamaremos **proceso de dispersión** a la desviación de las partículas respecto de la dirección inicial del movimiento, provocada por la interacción con un cierto sistema que se llamará dispersor.

La dispersión de un flujo de partículas se caracteriza por la sección eficaz elemental  $\sigma$  diferencial.

**Definición 5.4.1** *La densidad de flujo de un haz de neutrones viene definido por*

$$j_{inc} = \frac{\text{Num. de neutrones incidiendo en una superficie por segundo}}{\text{Area de la superficie perpendicular a la dirección del haz}} \quad (5.8)$$

**Definición 5.4.2** La sección eficaz elemental  $\sigma$  diferencial se define como la razón del número de partículas dispersadas  $dN_{disp}$  por unidad de tiempo, en el ángulo sólido  $d\Omega$ , con densidad de flujo  $j_{inc}$  de las partículas incidentes, es decir:

$$d\sigma(\theta, \varphi) = \frac{N_{disp}(\theta, \varphi)}{j_{inc}} \quad (5.9)$$

donde los ángulos  $\theta$  y  $\varphi$  determinan la dirección del movimiento de las partículas dispersadas.

El eje  $z$  está dirigido en el sentido del movimiento de las partículas incidentes, como muestra el siguiente esquema de dispersión.

Para nuestros fines, conviene representar  $dN_{disp}$  en la forma

$$dN_{disp}(\theta, \varphi) = j_{disp}(\theta, \varphi) dS \quad (5.10)$$

donde  $j_{disp}$  es la densidad de flujo de partículas dispersadas lejos del centro dispersor o muestra,  $dS$  es un elemento de superficie perpendicular al vector de posición, vector cuyo origen coincide con el centro dispersor y forma los ángulos  $\theta$  y  $\varphi$  respecto a los ejes de coordenadas adoptados.

La magnitud de  $dS$  está ligada con el elemento de ángulo sólido por la igualdad:

$$dS = r^2 d\Omega \quad (5.11)$$

Por lo que, la sección eficaz elemental diferencial queda:

$$d\sigma = \frac{j_{disp}}{j_{inc}} dS \quad (5.12)$$

Integrando la expresión anterior sobre todos los ángulos, obtenemos la cantidad:

$$\sigma = \frac{1}{j_{inc}} \oint j_{disp}(r, \theta, \varphi) dS = \frac{\Phi_{disp}}{j_{inc}} \quad (5.13)$$

donde  $\Phi_{disp}$  es el flujo de partículas dispersadas que atraviesa la superficie cerrada que rodea al centro dispersor. La superficie sobre la cual se realiza la integración se asume que está a gran distancia del centro dispersor, por lo que podemos considerar que en cada punto de esta superficie las partículas dispersadas viajan en dirección radial.

A esta cantidad  $\sigma$  se le llama **sección eficaz total de dispersión**.

#### 5.4.7. Dispersión elástica e inelástica

- En la dispersión elástica el estado interno, tanto del sistema dispersor como del dispersado, permanece invariable.

- En la dispersión inelástica el estado interno de uno o de ambos sistemas cambia. En la dispersión inelástica una parte de la energía cinética se convierte en energía interna o, recíprocamente, la energía interna se transforma en energía cinética.

En esta presentación estudiaremos el caso más simple, el de la dispersión elástica.

### 5.4.8. Dispersión elástica

En la dispersión elástica es posible prescindir del estado interno de los sistemas y, simplemente, llamar partículas a sistemas cualesquiera en interacción. En el proceso de dispersión tiene lugar la interacción de dos partículas, la dispersada y la dispersora. Además, muy a menudo la energía de interacción depende sólo de la distancia entre partículas. En este caso, el problema del movimiento de las dos partículas en interacción puede siempre reducirse al estudio del movimiento de una partícula (con masa reducida  $\mu$ ) en el campo de un centro de fuerzas inmóvil.

Amplitud de dispersión

Vamos a considerar un problema estacionario de dispersión. El movimiento de la partícula dispersada es no acotado y consecuentemente la energía del sistema es siempre positiva y no cuantificada, por lo que en la teoría de dispersión el espectro de energía es siempre continuo.

Si tomamos el origen de coordenadas en el centro dispersor fijo podemos describir la interacción de la partícula con este centro a través de la función potencial  $V(r)$  donde asumimos que esta función es no nula sólo en una parte limitada del espacio,  $r \leq a$ , que nosotros llamaremos rango de fuerza, donde el movimiento de la partícula que está siendo considerada obedece a la ecuación de Schrödinger,

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (5.14)$$

donde  $m$  es la masa de la partícula, en nuestro caso  $m = m_n$  masa del neutrón.

De (5.7) tenemos que

$$\vec{k}^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad (5.15)$$

La ecuación (5.14) toma la forma de

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r})\psi(\vec{r}) \quad (5.16)$$

Fuera del rango de fuerza, la partícula se mueve libremente y su estado es descrito por una onda plana en el plano complejo. Adoptando la dirección de movimiento de la partícula

incidente como el eje  $z$ , la función de onda que describe el estado de la partícula antes de su interacción con el centro dispersor es

$$\psi_{inc} = e^{ikz} \quad (5.17)$$

Se puede ver que esta función es una de las soluciones posibles de la ecuación (2.9) cuando el miembro derecho se anula.

Cerca del centro de fuerzas, la partícula experimenta dispersión y se modifica la forma de su función de onda. Sin embargo, una vez que la partícula dispersada se aleje y salga del rango de fuerza, ésta se moverá nuevamente como partícula libre. A grandes distancias de esta región las partículas dispersadas se mueven en dirección radial a partir del centro de fuerza, por lo que el movimiento de las partículas dispersadas deberá describirse por una onda esférica divergente,

$$\psi_{disp} = A(\sigma, \varphi) \frac{e^{ik\vec{r}}}{r} \quad (5.18)$$

donde  $r, \sigma, \varphi$  son coordenadas esféricas.

Debemos notar que, en la dispersión elástica, la cantidad  $k$  en las expresiones (5.17) y (5.18) es la misma y está determinada por la relación (5.15).

La función  $A(\sigma, \varphi)$  es llamada amplitud de dispersión y depende, por lo general, de ambos ángulos,  $\sigma$  y  $\varphi$ . Cuando  $V(\vec{r}) = V(r)$  la amplitud de dispersión depende solamente del ángulo  $\sigma$ .

La función de onda total que describe el movimiento de las partículas incidentes y dispersadas a grandes distancias del centro dispersor (cuando  $r \gg a$ ) puede presentarse en la forma:

$$\psi = e^{ikz} + A(\sigma, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (5.19)$$

donde el primer término describe el movimiento de las partículas incidentes y el segundo, el de las dispersadas. Debemos notar que el primer término en esta expresión está escrito en coordenadas cartesianas, y el segundo en coordenadas esféricas.

Según (5.12), hay que calcular las densidades de flujo de las partículas incidentes y dispersadas.

El flujo incidente está dado por:

$$j_{inc} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi_{inc}^* \nabla \psi_{inc} - \psi_{inc} \nabla \psi_{inc}^*) \quad (5.20)$$

teniendo en cuenta que  $\psi_{inc}$  depende sólo de  $z$  obtenemos

$$j_{inc} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi_{inc}^* \frac{d}{dz} \psi_{inc} - \psi_{inc} \frac{d}{dz} \psi_{inc}^*) = \frac{\hbar k}{m} = v \quad (5.21)$$

donde  $v$  es la velocidad de las partículas incidentes. Notese que se toma la función (5.17) normalizada.

★ *Derivación de la igualdad (5.21)*

El gradiente, en coordenadas esféricas, está dado por la expresión

$$\nabla\psi = \frac{\partial\psi}{\partial r}\hat{e}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial\sigma}\hat{e}_\sigma + \frac{1}{r\sin\varphi}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\hat{e}_\varphi. \quad (5.22)$$

Estamos interesados en la componente radial  $j_r$  del flujo de partículas dispersadas. Esta puede ser encontrada sustituyendo  $\nabla\psi$  por la componente radial  $\frac{\partial\psi}{\partial r}$ , esto es,

$$j_r = \frac{\hbar}{2mi}(\psi_{disp}^*\frac{\partial\psi_{disp}}{\partial r} - \psi_{disp}\frac{\partial\psi_{disp}^*}{\partial r}) = \frac{\hbar k}{mr^2}|A(\sigma, \varphi)|^2. \quad (5.23)$$

Sustituyendo (5.21) y (5.23) en (5.12),

$$d\sigma(\sigma, \varphi) = |A(\sigma, \varphi)|^2 d\Omega. \quad (5.24)$$

Es decir, la determinación de la sección eficaz diferencial de dispersión consiste en encontrar la amplitud de dispersión.

El cálculo de esta última se realiza de la siguiente forma: Se obtiene la solución de la ecuación de Schrödinger para el movimiento de una partícula en el campo del centro dispersor tal que a grandes distancias del mismo tenga la forma (5.19). Entonces el coeficiente del factor  $\frac{e^{ikr}}{r}$  dará la amplitud de dispersión.

La representación de la función de onda que describe el movimiento de una partícula lejos del centro dispersor en la ecuación (5.19), es decir, como suma de las ondas incidente y divergente, se ha llevado a cabo tomando como base consideraciones físicas simples e intuitivas; sin embargo, se puede demostrar que lejos del centro dispersor inmóvil  $V(\vec{r})$ , la solución de la ecuación de Schrödinger puede efectivamente escribirse en la forma (5.19).

Aproximación de Born

La resolución exacta de la ecuación de Schrödinger y el obtener  $A(\sigma, \varphi)$  entrarán, en la mayoría de los problemas, grandes dificultades matemáticas; por ello, en la teoría de la dispersión se aplican métodos aproximados, siendo el más importante de ellos **la aproximación de Born**. Este método se basa en la hipótesis de que la energía potencial de interacción de la partícula dispersada con el centro de fuerzas es pequeña, por lo que es posible considerarla como una perturbación.



# Bibliografía

- [1] ARAI, M. On essential self-adjointness of Dirac operators. *RIMS Kokyuroku, Kyoto Univ.* **242** (1975), 10-21.
- [2] ARAI, M. On essential self-adjointness, distinguished self-adjoint extension and essential spectrum of Dirac operators with matrix-valued potentials. *Publ. RIMS, Kyoto Univ.* **19** (1983), 33-57.
- [3] ARAI, M., YAMADA, O. Essential self-adjointness and invariance of the essential spectrum for Dirac operators. *Publ. RIMS, Kyoto Univ.* **18** (1982), 973-985.
- [4] ARRIZABALAGA, N. Distinguished self-adjoint extensions of Dirac operators via Hardy-Dirac inequalities. *J. Math. Phys.* **52** 092301 (2011).
- [5] ARRIZABALAGA, N., DUOANDIKOETXEA, J., VEGA, L. Self-adjoint extensions of Dirac operators with Coulomb type singularity. *arXiv:1211.5476*. (2012).
- [6] ARRIZABALAGA, N., MAS, A., VEGA, L. Shell interactions for Dirac operators. *arXiv:1303.2519* (2013).
- [7] BOUSSAID, N., D'ANCONA, P., FANELLI, F., Virial identity and weak dispersion for the magnetic dirac equation. *Journ. Math. Pures Appl.* **95** (2011), 137-150.
- [8] BREZIS, H., Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations. *Springer*, 1983.
- [9] DOLBEAULT, J., ESTEBAN, M.J., LOSS, M., VEGA, L. An analytical proof of Hardy-like inequalities related to the Dirac operator. *J. Funct. Anal.* **216** (2004), 1-21.
- [10] DOLBEAULT, J., DUOANDIKOETXEA, J., ESTEBAN, M.J., VEGA, L. Hardy-type estimates for Dirac operators. *Ann. Scient. Éc. Norm. Sup.* **40** (2007), 885-900.
- [11] DOLBEAULT, J., ESTEBAN, M.J., LOSS, M. Relativistic hydrogenic atoms in strong magnetic fields. *Ann. Henri Poincaré* **8** (2007), 749-779.
- [12] DUOANDIKOETXEA, J. Fourier Analysis. *American Mathematical Society*, (2001).

- [13] DUOANDIKOETXEA, J., VEGA, L. Some weighted Gagliardo-Nirenberg inequalities and applications. *Proc. Amer. Math. Soc.* **135** (2007), 2795-2802.
- [14] ESCAURIAZA, L., KENIG, C., E., PONCE, G., VEGA, L. Hardy's uncertainty principle, convexity and Schrödinger evolutions, *Mat. Journal*, **155** (2010), 163-187.
- [15] ESCAURIAZA, L., KENIG, C., E., PONCE, G., VEGA, L. Uniqueness properties of solutions to Schrödinger equations, *Am. J. Soc.* , **49** (2012), 415-442.
- [16] ESTEBAN, M.J., LOSS, M. Self-adjointness for Dirac operators via Hardy-Dirac inequalities. *J. Math. Phys.* **48**(11) (2007), 112107.
- [17] EVANS, L., C. Partial Differential Equations. *American Mathematical Society*, (1998).
- [18] FERNANDEZ, A. El principio de incertidumbre de Hardy y la ecuación de Schrödinger. *Tesina de Máster de Inic. a la Inv. en Mat.*, (2012).
- [19] FOLLAND, G. Introduction to Partial Diferential Equations. *Princeton University*, (1995).
- [20] FRITZ, J. Partial Differential Equations. *American Mathematical Society*, (1998).
- [21] KATO, T., *Perturbation Theory of Linear Operators*, 2nd edition, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (1980).
- [22] KLAUS, M., WÜST, R. Characterization and uniqueness of distinguished self-adjoint extensions of Dirac operators. *Comm. Math. Phys.* **64** (1979), 171-176.
- [23] MATTILA, P. Geometry of Sets and Measures in Euclidean Spaces. *Cambridge University Press*, (1995).
- [24] NENCIU, G. Self-adjointness and invariance of the essential spectrum for Dirac operators defined as quadratic forms. *Comm. Math. Phys.* **48** (1976), 235-247.
- [25] REED, M., SIMON, B. Functional Analysis I. *Methods of Modern Mathematical Physics*, (1980).
- [26] RIESZ, F., NAGY, B. Functional Analysis. *Michigan University*, (1956).
- [27] SCHMINCKE, U.-W., Essential self-adjointness of Dirac operators with strongly singular potential. *Math. Z.* **126** (1972), 71-81.
- [28] SCHMINCKE, U.-W., Distinguished self-adjoint extensions of Dirac operators. *Math. Z.* **129** (1972) 335-349.
- [29] THALLER, B., *The Dirac Equation*, Springer-Verlag, (1992).

- 
- [30] VOGELSANG, V., Remark on essential self-adjointness of Dirac operators with Coulomb potentials. *Math. Z.* **196** (1987), 517-521.
  - [31] WEIDMANN, J., Oszillationsmethoden für Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen. *Math. Z.* **119** (1971), 349-373.
  - [32] WÜST, R., A convergence theorem for self-adjoint operators applicable to Dirac operators with cut-off potentials. *Math. Z.* **131** (1973), 339-349.
  - [33] WÜST, R., Distinguished self-adjoint extensions of Dirac operators constructed by means of cut-off potentials. *Math. Z.* **141** (1975), 93-98.
  - [34] WÜST, R., Dirac operators with strongly singular potentials. *Math. Z.* **152** (1977), 259-271.