Aula

5

A estrutura métrica

META

Estudar propriedades dos espaços métricos, com especial ênfase nos espaços completos com relação à métrica gerada pelo produto escalar. Estudar a ação de operadores sobre as funções de um espaço de Hilbert.

OBJETIVOS

Ao final desta aula, o aluno deverá ser capaz de: conceituar métrica e espaço métrico; diferenciar sequências de Cauchy de sequências convergentes; conceituar completeza de um espaço métrico; reconhecer um produto escalar, por suas propriedades; trabalhar com funcionais e operadores, obter adjuntos de operadores, calcular autovalores e autovetores.

PRÉ-REQUISITOS

Aulas anteriores, sobre espaços vetoriais e funções analíticas.

INTRODUÇÃO

As teorias da Física constituem uma imagem matemática dos fenômenos físicos. No substrato dessas teorias, encontramos quase sempre espaços que, além de possuírem uma estrutura linear, têm uma métrica, ou noção de distância entre os pontos do espaço. No caso especial da teoria quântica, o aparato matemático é constituído de funções pertencentes a um espaço de Hilbert, e de operadores que atuam sobre essas funções. Tais operadores são a representação matemática dos observáveis físicos, como energia e momento. Assim, torna-se imprescindível adquirir um bom embasamento matemático nesses temas.

Vamos voltar ao conjunto de elementos, que chamamos inicialmente "espaço", sem nenhuma estrutura adicional. Inclusive, sem a estrutura linear dos espaços vetoriais.

Vamos adicionar uma estrutura geométrica ao conjunto de pontos do espaço: suponha agora que conheçamos as distâncias entre cada par de pontos do espaço. A isso se chama espaço métrico, e essa noção de distância é a métrica. Formalizemos esses conceitos.

Definição de Métrica Suponha que, num espaço $M = \{x, y, \ldots\}$ esteja definida a função $d(x, y)$,

$$d : M \times M \longrightarrow \mathbf{R}_+ ;$$

em outros termos, d é uma função que leva pares ordenados (x, y), $x, y \in M$, em números reais não-negativos. Se as seguintes propriedades valerem:

(M1) $d(x, y) \geq 0$; $d(x, y) = 0 \iff x = y$ (positividade-definida)

(M2) $d(x, y) = d(y, x)$, $\forall x, y \in M$ (simetria)

(M3) $d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z), \forall x, y, z \in M$ (sub-aditividade, também conhecida como desigualdade triangular)

então d é uma métrica sobre M.

Definição de Espaço Métrico Nessas condições, o par $\{M, d\}$ é chamado espaço métrico. Por um abuso de linguagem, costumamos dizer que M é um espaço métrico (subentendendo a métrica d).

Exemplo O exemplo talvez mais simples é $M = \mathbf{R}$ (reta real), munido da métrica

$$d(x, y) = |x - y| .$$

Exemplo Em $\mathbf{R}^3$, sendo

$$\mathbf{a} = a_x\mathbf{i} + a_y\mathbf{j} + a_z\mathbf{k}$$

$$\mathbf{b} = b_x\mathbf{i} + b_y\mathbf{j} + b_z\mathbf{k}$$

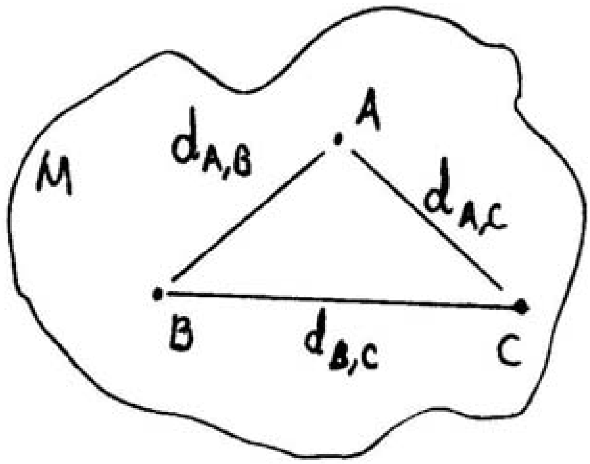

Figura 5.1: A noção de métrica ou distância entre pontos.

tem-se um espaço métrico com relação à:

$$d(a,b) = \sqrt{(a_x - b_x)^2 + (a_y - b_y)^2 + (a_z - b_z)^2} \,.$$

Exemplo Os exemplos anteriores podem nos induzir a pensar que a métrica está definida apenas em espaços lineares. Este exemplo mostra que não. Seja $\{A, B\}$ um conjunto de apenas dois pontos, e seja a noção de distância dada por:

$$d(A,A) = d(B,B) = 0\,,$$
$$d(A,B) = d(B,A) = 1\,.$$

Para este último exemplo, você pode provar que as propriedades (M1)-(M3) estão satisfeitas. Portanto, *a estrutura métrica é independente da estrutura linear*. E reciprocamente.

Um conceito não-trivial, e até certo ponto não muito intuitivo é o de completeza. Esse conceito é introduzido através da (sutil) diferença entre dois outros conceitos, o de sequência de Cauchy, e o de sequência convergente. Já o conceito de convergência como o de pontos numa reta real é intuitivo, e é definido matematicamente através da métrica.

Definição de Sequência Convergente Uma sequência de pontos $v_1, v_2, \ldots$ de um espaço métrico é convergente para um ponto

v do espaço se

$$\lim_{n\to\infty} d(v_n, v) = 0\,.$$

Se a distância entre os pontos v_n e v vai diminuindo à medida que n aumenta, intui-se que os pontos v_n vão se aproximando de v. Analise com cuidado esta outra definição:

Definição de Sequência de Cauchy Uma sequência de pontos $v_1, v_2, \ldots$ de um espaço métrico é de Cauchy se

$$\lim_{m,n\to\infty} d(v_m, v_n) = 0\,.$$

Aqui, os pontos v_m e v_n vão se aproximando à medida que m e n crescem.

Seriam equivalentes os dois conceitos? Esta pergunta divide-se em duas outras,

(i) uma sequência convergente é de Cauchy?

(ii) uma sequência de Cauchy é convergente?

Para (i), a resposta é sim. De fato: suponha que $v_1, v_2, \ldots$ é convergente para um v do espaço. Então,

$$\begin{aligned}\lim_{m,n\to\infty} d(v_m, v_n) &\leq \lim_{m,n\to\infty} [d(v_n, v) + d(v, v_m)]\\ &= \lim_{n\to\infty} d(v_n, v) + \lim_{m\to\infty} d(v, v_m) = 0\end{aligned}$$

onde foi usada a desigualdade triangular (M3).

Mas (ii) nem sempre é verdadeira! Veremos isso através dos exemplos a seguir.

Exemplo Vamos indicar por $\mathbf{Q}_+$ o conjunto dos números racionais, ou seja números da forma m/n onde m e n são inteiros, excluídos os negativos e o zero. Sendo a métrica dada por

$$d(x, y) = |x - y|\,,$$

a sequência de pontos de $\mathbf{Q}_+$, $1, 1/2, 1/3, \ldots, 1/n, \ldots$ é de Cauchy, pois

$$\lim_{m,n\to\infty} \left|\frac{1}{n} - \frac{1}{m}\right| \leq \lim_{n\to\infty} \left|\frac{1}{n}\right| + \lim_{m\to\infty} \left|\frac{1}{m}\right| = 0\,.$$

Porém, a sequência não é convergente em $\mathbf{Q}_+$: na verdade, ela converge para zero, que não pertence a $\mathbf{Q}_+$.

Um outro exemplo na mesma linha é o da sequência

$$(1+\frac{1}{1})^1, (1+\frac{1}{2})^2, (1+\frac{1}{3})^3, \ldots, (1+\frac{1}{n})^n, \ldots$$

em $\mathbf{Q}$ (conjunto de todos os racionais). Essa sequência é de Cauchy, mas não é convergente em $\mathbf{Q}$ (de fato, essa sequência é famosa, converge para $e = 2,7182818284...$ que é um irracional).

Definição de Espaço Métrico Completo Um espaço métrico é completo se todas as sequências de Cauchy desse espaço são convergentes para pontos do espaço.

Partindo-se de um espaço métrico incompleto (como $\mathbf{Q}$ do exemplo anterior), pode-se "completá-lo" anexando-se a ele todos os limites de sequências de Cauchy, ou seja, incluindo-se (todos) os números irracionais. Aliás, quando escrevemos $\pi = 3,14159\ldots$ estamos pensando em:

$$\pi = 3 + \frac{1}{10} + \frac{4}{100} + \frac{1}{1000} + \frac{5}{10000} + + \frac{9}{100000} + \ldots$$

que nada mais é do que uma sequência de Cauchy de números racionais, sequência essa que tende ao número irracional π.

Há muitas classes particulares importantes de espaços métricos. A dos <u>espaços normados</u> é uma delas. Vamos falar algumas palavras sobre essa classe.

Uma <u>norma</u> é uma métrica com duas propriedades adicionais (além das propriedades (M1)-(M3)):

(N4) $d(x-z, y-z) = d(x,y)\,, \quad \forall x,y,z \in M\,;$
(invariância por translação)

(N5) $d(\alpha x, \alpha y) = |\alpha| d(x,y)\,, \quad \forall x,y \in M$
(homotetia)

Em três dimensões, isto é, em $\mathbf{R}^3$, notamos que a norma de um vetor descreve exatamente o comprimento desse vetor. Indica-se a norma por um símbolo semelhante ao módulo, mas "dobrado",

$$||x-y|| = d(x-y,0) = d(x,y)\,.$$

E também,

$$||x|| = d(x, 0)\,,$$

que é exatamente o comprimento do vetor $\mathbf{x}$, que tem sua origem em $\mathcal{O}$ e extremidade no ponto $\mathbf{x}$ do espaço.

Num espaço normado, que consiste num espaço linear munido de uma norma, a distância entre pontos é dada pela norma. Um espaço normado completo por essa noção de distância é chamado espaço de Banach.

Há uma subclasse dos espaços normados, essa de extrema importância para nós físicos: os espaços com produto escalar, ou pré-Hilbertianos, e os próprios espaços de Hilbert.

Primeiramente convém definir produto escalar (lembremos que os matemáticos preferem o termo "produto interno").

Definição de Produto Escalar Seja V um espaço vetorial sobre o corpo K. Um produto escalar $(.,.)$ é uma função que associa um escalar de K à cada par ordenado (x, y) de vetores de V, sendo verificadas as propriedades:

(i) $(x + y, z) = (x, z) + (y, z)\,, \quad \forall x, y, z \in V \quad ;$

(ii) $(x, ky) = k(x, y)\,, \quad \forall x, y \in V\,, \forall k \in K \quad ;$

(iii) $(x, y) = (y, x)^*\,, \quad \forall x, y \in V \quad ;$

(iv) $(x, x) \geq 0\,, \quad (x, x) = 0 \iff x = 0 \quad .$

Note que (ii) e (iii) implicam em:

$$(kx, y) = k^*(x, y)\,.$$

Uma função é dita **antilinear** quando $f(kx) = k^* f(x)$, onde k^* é o complexo conjugado de k.

Assim, o produto escalar é linear na segunda posição e **antilinear** na primeira posição de $(.,.)$. Esta é a convenção que usamos em Física; os matemáticos costumam adotar a convenção inversa, exigindo a linearidade na primeira posição e antilinearidade na segunda posição do produto interno.

O produto escalar relaciona-se com a norma por:

$$(x, x) = ||x||^2\,,$$

e com a métrica através de

$$(x-y, x-y) = ||x-y||^2 = [d(x,y)]^2 \,.$$

Quando a métrica é gerada por um produto escalar, usamos para ela o termo métrica natural.

Um espaço linear munido de um produto escalar é chamado "espaço com produto escalar", ou espaço pré-Hilbertiano.

Se um espaço desse tipo for **completo** pela métrica gerada pelo produto escalar (métrica natural),

$$d(x,y) = \sqrt{(x-y, x-y)}\,,$$

então esse espaço é chamado espaço de Hilbert.

Um espaço é **separável** se possuir uma base com um conjunto enumerável de elementos, $v_1, v_2, \ldots$. Exclui-se portanto dessa categoria os espaços com bases contínuas $\{v_\alpha\}$, onde $\alpha \in [a,b] \subset \mathbf{R}$.

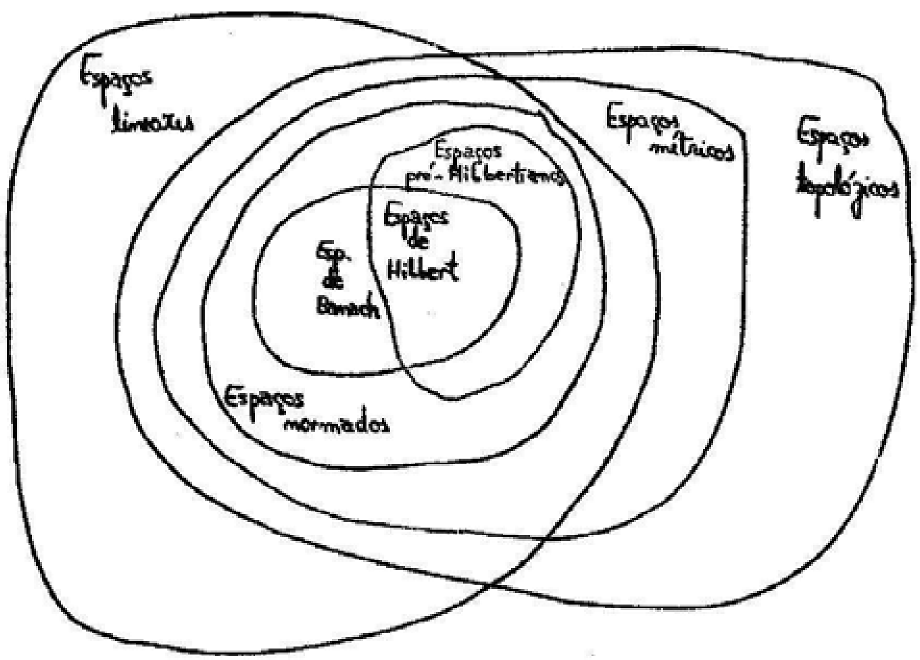

Figura 5.2: Um diagrama ilustrativo de relações de inclusão entre vários tipos de espaços.

Alguns autores empregam outra definição, exigindo para os espaços de Hilbert duas outras qualidades: ser **separável** e ter dimensão infinita.

Os espaços de Hilbert da Mecânica Quântica satisfazem, em geral, essas condições. Eles compõem a estrutura matemática básica, o substrato matemático da teoria quântica, pelo menos segundo a formulação de von Neumann.

É interessante observar, na figura 5.2 as relações de inclusão entre os diversos tipos de espaços que apresentamos até agora. Os espaços topológicos nós não os discutimos ainda; eles são mais gerais que os espaços métricos, e a estrutura topológica, como a métrica, é totalmente independente da estrutura linear. A grosso modo, a topologia generaliza o conceito de geometria.

O conceito de função é nosso velho conhecido. Por esse nome, indicamos principalmente objetos que fazem associações do tipo:

$$f : \mathbf{R} \longrightarrow \mathbf{R}$$

ou seja, f associa um número real à outro número real.

Uma função que associa:

$$f : V\,(\text{sobre } K_1) \longrightarrow K_2 \quad (K_1 \subset K_2)$$

isto é, leva vetores em escalares, é chamada <u>funcional</u>.

Outros nomes particulares para funções: <u>transformação</u> (ou mapeamento),

$$T : V_1 \longrightarrow V_2 \quad (V_1 \neq V_2)\,;$$

um <u>operador</u> num espaço vetorial V tem a ação:

$$A : V \longrightarrow V\,.$$

Um <u>operador linear</u> A num espaço linear V sobre K obedece as restrições:

(i) $A\,(x+y) = A\,x + A\,y\,, \quad \forall x, y \in V \quad ;$

(ii) $A\,(kx) = k\,A\,x\,, \quad \forall x \in V\,, \forall k \in K \quad .$

Da mesma forma, diz-se que um <u>funcional</u> $f : V \to K$ é <u>linear</u> se:

(i) $f(x+y) = f(x) + f(y)\,, \quad \forall x, y \in V \quad ;$

(ii) $f(kx) = k\,f(x)\,, \quad \forall x \in V\,, \forall k \in K \quad .$

Um <u>funcional</u> é <u>antilinear</u> (ou <u>semilinear</u>) quando verifica (i) acima e:

(ii') $f(kx) = k^* f(x)\,, \quad \forall x \in V\,, \forall k \in K \quad .$

Uma transformação $T : V_1 \to V_2$ é dita linear quando

(i) $T\,(x + y) = T\,x + T\,y\,, \quad \forall x, y \in V \quad ;$

(ii) $T\,(kx) = k\;T\,x\,, \quad \forall x \in V\,, \forall k \in K \quad .$

Os conceitos e definições apresentados até aqui foram bastante gerais. Chegou o momento de particularizá-los ao tipo de espaço de nosso interesse, visando especialmente a Mecânica Quântica. As próximas definições, como adjunto de um operador, operadores Hermiteanos, dentre outras, serão definidas apenas sobre a classe particular dos espaços de Hilbert, muito embora tais conceitos e definições possam ser desenvolvidos para espaços mais gerais.

A quantidade mais significativa em Mecânica Quântica com certeza é a função de onda. No mundo dos átomos e moléculas, as partículas (como por exemplo os elétrons) comportam-se como se fossem ondas, e são descritas, matematicamente, pelas funções de onda $\psi(x)$. Estas são obtidas resolvendo-se a famosa "equação de Schrödinger", que fundamentalmente é uma equação de onda para o movimento de um constituinte sub-atômico, como o elétron. O módulo ao quadrado da função de onda,

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\,\psi(x)\,,$$

está associado, fisicamente falando, com a probabilidade de encontrar uma partícula em dada posição x. Quando falamos de probabilidades, é desejável que a probabilidade total de ocorrência de dado fenômeno seja de 100% ou 1. Assim, a probabilidade total de achar a partícula deve ser 1, somando as probabilidades em todos os pontos do eixo x,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2\,dx = 1\,,$$

e nesse caso dizemos que $\psi(x)$ está normalizada.

Se a função de onda não estiver normalizada, espera-se que pelo menos verifique:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2\,dx = M < \infty\,;$$

dizemos nesse caso que $\psi(x)$ é normalizável: podemos definir uma outra função de onda $\Psi(x)$,

$$\Psi(x) = \frac{\psi(x)}{\sqrt{M}}\,,$$

e essa nova função obedece a

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 \, dx = 1 \, .$$

O espaço de todas as funções de onda $\psi(x)$, definidas sobre toda a reta real $\mathbf{R}$, e de módulo quadrado integrável, é um espaço linear.

Além disso, a esse espaço pode ser agregada uma noção de distância, através do produto escalar:

$$(\varphi, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^* \, \psi \, dx \, ;$$

$$d(\varphi, \psi) = \sqrt{(\varphi - \psi, \varphi - \psi)} \, ; \qquad ||\varphi|| = \sqrt{(\varphi, \varphi)} \, .$$

O espaço linear das funções de onda de quadrado integrável, com o produto escalar acima, é um espaço de Hilbert. Isto é, trata-se de um espaço completo em relação à sua métrica natural, além de ser separável e de dimensão infinita. O corpo desse espaço linear é $\mathbf{C}$.

A integral que aparece nas expressões acima pode ser entendida segundo o conceito de integral de Riemann. Ou, se desejar uma generalização, encare-se o símbolo de integral no sentido de Lebesgue. O espaço das funções de onda é então denotado $L^2(\mathbf{R})$, quando tais funções forem definidas sobre $\mathbf{R}$ todo. Se forem definidas num intervalo $[a, b] \subset \mathbf{R}$, o espaço é indicado $L^2([a, b])$.

O corpo desse espaço linear é $\mathbf{C}$. As funções de onda também podem assumir valores complexos,

$$\psi : \mathbf{R} \longrightarrow \mathbf{C} \, .$$

Igualmente, $L^2([a, b])$, $L^2([0, \infty))$, etc., são espaços de Hilbert.

Todos os operadores sobre os quais falaremos são supostamente lineares.

Introduzida a métrica, podemos definir o conceito de operador (linear) limitado sobre um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$.

Definição de Operador Limitado Um operador A em $\mathcal{H}$ é limitado se

$$||A\psi|| < \infty \, , \forall \psi \in \mathcal{H}$$

isto é,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |A\psi(x)|^2 \, dx < \infty \, .$$

Poucos operadores em Mecânica Quântica são limitados. A Hamiltoniana do oscilador harmônico quântico é um exemplo de operador limitado,

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \,.$$

Em compensação, o operador posição x em geral é não-limitado. Vejamos o porquê. Seja $\psi \in \mathcal{H}$, isto é,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \, dx < \infty \,.$$

Mas pode ser que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |x\psi(x)|^2 \, dx = \infty$$

já que o fator multiplicativo x^2 que se insere no integrando pode ocasionar a divergência da integral.

Dizemos que <u>aquelas</u> funções de onda $\psi \in \mathcal{H}$ para as quais

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |x\psi(x)|^2 \, dx < \infty$$

estão no <u>domínio</u> do operador x. O domínio de x em geral não é $\mathcal{H}$ todo, mas parte dele, que indicamos $\mathcal{D}(x)$.

Definição de Operador Contínuo Um operador A em $\mathcal{H}$ é contínuo se, para toda sequência $\{\varphi_n\} \subset \mathcal{H}$ convergente para $\varphi \in \mathcal{H}$, a sequência $\{A\varphi_n\}$ for convergente para $A\varphi \in \mathcal{H}$:

$$\varphi_n \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} \varphi \qquad \Rightarrow \qquad A\varphi_n \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} A\varphi$$

(convergência no sentido da métrica natural).

Teorema Num espaço normado, um operador linear <u>limitado</u> é <u>contínuo</u> e vice-versa.

Quando falarmos em operador, você deve pensar em duas coisas: (i) uma lei funcional que associa pares de vetores (ou funções de onda!); (ii) um domínio. É tão importante qual seja o domínio do operador, que indicaremos frequentemente o operador A por $\{A, \mathcal{D}(A)\}$.

Definição de Adjunto de um Operador Dado um operador $\{A, \mathcal{D}(A)\}$ em $\mathcal{H}$, o adjunto $\{A^\dagger, \mathcal{D}(A^\dagger)\}$ desse operador é definido por:

(i) $\mathcal{D}(A^\dagger) = \{\varphi \in \mathcal{H}$ tal que $\exists|\, \widetilde{\varphi} \in \mathcal{H}$ com $(A\psi, \varphi) = (\psi, \widetilde{\varphi})$, $\forall \psi \in \mathcal{D}(A)\}$;

(ii) $A^\dagger \varphi = \widetilde{\varphi}$.

É bom observar que alguns autores indicam também o adjunto do operador A pelo símbolo A^*. Tal símbolo também é usado na figura 5.3. Nos casos de interesse, tem-se $\mathcal{D}(A^\dagger) \supset \mathcal{D}(A)$.

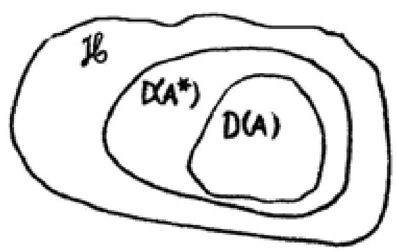

Figura 5.3: Os domínios de um operador A e de seu adjunto A^*.

Um operador A tal que:

(i) $\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{D}(A^\dagger)$;

(ii) $A^\dagger \varphi = A\varphi\,, \quad \forall \varphi \in \mathcal{D}(A)$

é chamado Hermiteano (pelos físicos. Os matemáticos chamam-nos de operadores simétricos). As condições (i) e (ii) são abreviadas por $A \subset A^\dagger$ (A é uma restrição de $A^\dagger$ ao domínio $\mathcal{D}(A)$; diz-se também que $A^\dagger$ é uma extensão do operador A ao domínio $\mathcal{D}(A^\dagger)$).

Um operador tal que $A = A^\dagger$, isto é,

(i) $\mathcal{D}(A) = \mathcal{D}(A^\dagger)$;

(ii) $A\varphi = A^\dagger\varphi\,, \quad \forall\varphi \in \mathcal{D}(A)$

é chamado auto-adjunto.

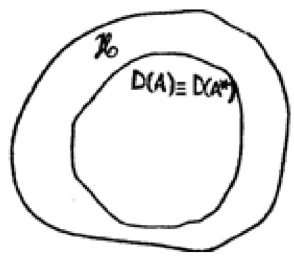

Figura 5.4: O domínio de um operador auto-adjunto $A = A^*$.

O operador A é unitário quando $A^\dagger = A^{-1}$ (normalmente, trata-se de operadores limitados).

Os operadores de projeção P são auto-adjuntos e idempotentes,

(i) $P^\dagger = P$;

(ii) $P^2 = P$

(também em geral são limitados).

O comutador de dois operadores A e B é definido por

$$[A, B] = AB - BA\,;$$

quando esse comutador se anula, dizemos que A e B comutam.

Os operadores normais comutam com seus adjuntos:

$$[A, A^\dagger] = AA^\dagger - A^\dagger A = 0\,.$$

Quando se trata de operadores limitados em $\mathcal{H}$, os conceitos de operador Hermiteano e auto-adjunto são idênticos. Mas, no caso contrário, são distintos. Em Física é comum termos operadores Hermiteanos, e não auto-adjuntos; o que se pode fazer é buscar extensões auto-adjuntas desses operadores, mas não discutiremos esse procedimento aqui.

Uma equação do tipo

$$A\varphi = \lambda\varphi\,.$$

é chamada equação de autovalores.

Nessa equação, A é um operador, λ é um escalar de $\mathbf{R}$ ou $\mathbf{C}$, e φ uma função pertencente a um espaço de Hilbert. Note que a mesma função φ aparece nos dois lados da equação.

A equação terá solução para alguns valores do número λ, que serão chamadas autovalores. Para cada autovalor λ, a solução para φ é chamada autofunção correspondente àquele autovalor. Por exemplo, a equação de Schrödinger é uma equação de autovalores. O conjunto de todos os autovalores de dado operador é referido como seu espectro.

Alguns operadores *auto-adjuntos* têm apenas um conjunto enumerável $\lambda_1, \lambda_2, \ldots \in \mathbf{R}$ de autovalores; nesse caso nós dizemos que o seu espectro é discreto: são os operadores (auto-adjuntos) compactos, também chamados de operadores completamente contínuos.

A definição formal dos operadores **compactos** envolve o conceito topológico de compacidade, que não introduziremos aqui. Vamos entender, então, que os operadores compactos são os que têm espectro discreto.

Observe que neste caso de operadores auto-adjuntos compactos, os autovalores serão sempre reais. Na Mecânica Quântica, as grandezas físicas (são também chamadas "observáveis físicos") como energia, momento, são representadas por operadores. O fato de escolhermos operadores auto-adjuntos para representar os observáveis está muito ligado à resolução de equações de autovalores para esses operadores: os autovalores desses operadores correspondem às medidas físicas (por exemplo, da energia, do momento) que, como se pode esperar de medidas físicas, correspondem à números reais. Operadores que não sejam auto-adjuntos podem ter autovalores complexos.

Chegamos a um ponto importante deste capítulo.

Teorema Espectral (para operadores auto-adjuntos compactos, portanto com espectro puramente discreto) O conjunto de autofunções de um operador auto-adjunto compacto é completo, isto é, forma uma base para o espaço de Hilbert.

Seja $\{\psi_1, \psi_2, \ldots\}$ tal base. Então, qualquer função do espaço de Hilbert pode ser escrita como combinação linear dos elementos dessa base:

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} (\psi_n, \psi)\psi_n \qquad (I)\,.$$

Utilizando a **notação de Dirac**,

$$\begin{aligned}\underbrace{|\psi\rangle} &= \sum_{n=1}^{\infty} \langle\psi_n|\psi\rangle\, |\psi_n\rangle \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n\rangle\, \langle\psi_n| \underbrace{\psi\rangle}\end{aligned}$$

e, observando os grifos sob $|\psi\rangle$, escrevemos (formalmente):

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n\rangle\, \langle\psi_n| = 1\,.$$

Estudaremos com cuidado a **notação de Dirac** na próxima aula. Mas, antecipando um pouco, os objetos como $|\psi\rangle$ são chamados "kets", e "bras" são os invertidos $\langle\varphi|$. O produto escalar das funções φ e ψ é dado pelo "bracket"(parênteses em inglês): $\langle\varphi|\psi\rangle$.

Esta última expressão nós a chamaremos "resolução da identidade", ou "expansão da unidade".

Por outro lado, para os operadores que não são compactos (embora sejam auto-adjuntos), *não se pode a priori afirmar* que seja válida uma relação do tipo *(I)*. De fato: neste caso, é possível que o espectro seja contínuo, os autovalores podendo assumir qualquer valor dentro de um intervalo da reta real, por exemplo $\lambda \in [a, b] \subset \mathbf{R}$.

Veja o seguinte exemplo: vamos encontrar as autofunções do operador momento linear p (isto é um abuso de linguagem: na verdade, uma coisa é a grandeza física momento, outra coisa é o operador matemático que a representa. Mas esta fusão entre os termos matemático e físico é bem comum na área). Esta grandeza está associada ao operador diferencial $-i\hbar d/dx$, cuja ação sobre uma função de onda ψ é dada por:

$$p\,\psi = -i\hbar\frac{d\psi}{dx}\,.$$

A equação de autovalores, que determina os autovalores possíveis de p é:

$$p\,\psi = -i\hbar\,\frac{d\psi}{dx} = \lambda\,\psi$$

e, resolvendo essa equação diferencial, achamos

$$\psi = e^{i\lambda x}$$

($\lambda \in \mathbf{R}$).

Essas seriam portanto as autofunções de p, e estão associadas aos autovalores λ, que podem ser números (reais) quaisquer! Então, o espectro de p é contínuo, $\lambda \in (-\infty, +\infty)$. Mas, note que:

$$||e^{i\lambda x}||^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} |e^{i\lambda x}|^2 \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} 1.dx = +\infty$$

ou seja, a solução encontrada $e^{i\lambda x}$ na realidade não pertence ao espaço de Hilbert das funções de onda de quadrado integrável... As autofunções de p estão "fora" do espaço de Hilbert, não há autofunção alguma de p em $\mathcal{H}$, quanto mais um conjunto completo delas!

Apesar disso, usamos cotidianamente em Mecânica Quântica tais autofunções (diz-se que os procedimentos são "heurísticos", o que quer dizer que não são rigorosamente válidos do ponto de vista matemático). É comum fazermos expansões em termos de um "conjunto completo" de autofunções como $e^{i\lambda x}$,

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \, |e^{i\lambda x}) \, (e^{i\lambda x}|\psi\rangle$$

(os brás e kets arredondados indicam que as funções envolvidas não são normalizáveis, isto é não pertencem ao espaço $\mathcal{H}$), e usarmos "resoluções da identidade" como

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \, |e^{i\lambda x}) \, (e^{i\lambda x}| = 1 \, .$$

A rigor, procedimentos injustificados. Porém, com a introdução de novos conceitos (como a autofunção generalizada), com a extensão do espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ para um espaço "maior" ϕ', podemos superar tais dificuldades. O instrumental a que me refiro são os espaços de Hilbert equipados (em inglês, são indicados pela sigla *RHS*, de *rigged Hilbert spaces*), que voltaremos a encontrar na nona aula deste curso.

ATIVIDADES

1. Mostre que o produto escalar usual de vetores de $\mathbf{R}^3$,

$$(\vec{a}, \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3$$

(onde $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3)$, $\vec{b} = (b_1, b_2, b_3)$) satisfaz a definição para produto escalar (propriedades (i) a (iv)).

2. Seja $\mathcal{H}$ o espaço das funções de onda de quadrado integrável sobre o corpo $\mathbf{C}$ dos complexos. Mostre que

$$(f(x), g(x)) = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)\, g(x)\, dx$$

é produto escalar em $\mathcal{H}$. Tome $\int dx$ como uma integral usual, de Riemann.

3. Mostre que o espaço de todas as funções de onda $\psi(x)$ definidas em $\mathbf{R}$ e de módulo quadrado integrável é um espaço linear.

4. De que classe de funções é constituído o domínio do operador

$$p = -i\hbar \frac{d}{dx}\,?$$

5. Considere o operador posição x no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ das funções de onda de quadrado integrável em $[0, 1]$,

$$\psi(x) \in \mathcal{H} \Longrightarrow \int_0^1 |\psi(x)|^2\, dx = M < \infty\,.$$

Mostre que x é um operador limitado nesse espaço, e determine todos os seus autovalores e autovetores.

COMENTÁRIO SOBRE AS ATIVIDADES

Para resolver estes exercícios, você deve recordar definições e propriedades do texto. Há também problemas resolvidos, que podem servir de exemplo para atacar estes exercícios. Antes de mais nada, você deve procurar responder à pergunta: quais as propriedades que definem um produto escalar? E um espaço vetorial? A prova de que um espaço é linear passa pela demonstração de que ele satisfaz cada uma daquelas dez propriedades! No último exercício você terá que achar autovalores e autovetores do operador x; isso pode ser mais fácil do que você está pensando! Discuta com os colegas esse último problema.

CONCLUSÃO

A análise da atuação de operadores sobre espaços de Hilbert envolve conceitos importantes, como equações de autovalores, espectros discretos e contínuos de operadores auto-adjuntos, bases de funções que geram resoluções da identidade. Todos esses conceitos e propriedades são de uso corrente em Física Quântica.

RESUMO

Nesta aula introduzimos conceitos relevantes de espaços com propriedades métricas, particularmente os espaços de Hilbert. São estudadas também as ações de funcionais e operadores sobre as funções desses espaços.

PRÓXIMA AULA

Retomaremos a teoria de operadores em espaços de Hilbert, fazendo uso intensivo da notação de Dirac da Mecânica Quântica.

REFERÊNCIAS

ARFKEN, George; WEBER, Hans. Física Matemática. Rio de Janeiro: Elsevier, 2007.

BUTKOV, Eugene. Física Matemática. Rio de Janeiro: Guanabara 2, 1978.

KOLMOGOROV, A.; FOMINE, S. Eléments de la Théorie des Fonctions et de l'Analise Fonctionelle. Moscou: MIR, 1977.

COURANT, R.; HILBERT, D. Methods of Mathematical Physics. New York: Wiley, 1953.