Aula
6

A notação de Dirac

META

Apresentar a notação de "bras" e "kets" introduzida por Dirac para simplificar a escrita de expressões teóricas da Física Quântica.

OBJETIVOS

Ao final desta aula, o aluno deverá ser capaz de: operar com "bras" e "kets", segundo as propriedades de linearidade e antilinearidade; identificar a relação entre "bras" e "kets", sabendo construir um "bra" correspondente a um "ket", e vice-versa; trabalhar com operadores atuando sobre "kets", em particular os Hermiteanos e os de projeção.

PRÉ-REQUISITOS

Assunto da aula anterior, sobre espaços métricos.

INTRODUÇÃO

Desenvolveu-se, a partir do início do século XX, uma nova mecânica para o mundo microscópico - a Mecânica Quântica. Esta, utiliza um ferramental matemático sofisticado: equações de autovalores, operadores Hermiteanos atuando sobre funções de onda pertencentes a um espaço de Hilbert, funções especiais diversas (como as de Legendre e Bessel), tudo isso é usado na solução de potenciais representando situações físicas envolvendo átomos ou moléculas. A notação de Dirac veio se somar a esse aparato no sentido de simplificar a redação das relações da Mecânica Quântica.

Aula 6

Vamos começar com um espaço $\mathcal{H}$ de "vetores" indicados por símbolos kets (a partir deste ponto vamos abandonar as haspas nos termos bras e kets, por simplicidade de redação),

$$\mathcal{H} = \{ |\ \ \rangle \} .$$

Dotamos esse espaço de uma estrutura linear, com a introdução da operação de adição de kets,

$$|a\rangle + |b\rangle = |c\rangle$$

(essa operação deve satisfazer as seguintes propriedades: fechamento, comutativa, associativa, existência de elemento neutro - que indicamos por $|0\rangle$ - e elemento inverso aditivo), e uma operação de multiplicação de um ket por um escalar (número complexo),

$$z\,|a\rangle = |b\rangle$$

(com as propriedades do fechamento, distributivas, "associativa", e existência de elemento neutro multiplicativo, que é o $1 \in \mathbf{C}$).

Suponhamos que nesse espaço esteja definido um produto escalar, que associa à cada par de kets de $\mathcal{H}$, $|a\rangle$ e $|b\rangle$, um número complexo

$$(|a\rangle, |b\rangle) \ .$$

Lembremo-nos de que um produto escalar, segundo nossa definição, é linear na segunda posição e antilinear na primeira posição, e é positivo-definido.

Precisaremos adiante da seguinte propriedade, conhecida como desigualdade de Cauchy-Schwarz:

$$|\,(|a\rangle, |b\rangle)\,|^2 \leq (|a\rangle, |a\rangle)\ \cdot\ (|b\rangle, |b\rangle)\,.$$

Tal desigualdade pode ser provada da seguinte maneira. Como o produto escalar é positivo-definido,

$$(|a\rangle + z|b\rangle, |a\rangle + z|b\rangle) \geq 0$$

$$(|a\rangle, |a\rangle) + z(|a\rangle, |b\rangle) + z^*(|b\rangle, |a\rangle) + zz^*(|b\rangle, |b\rangle) \geq 0\,.$$

Em particular, essa relação vale para

$$z = -\frac{(|b\rangle, |a\rangle)}{(|b\rangle, |b\rangle)}\,,$$

e com essa escolha,

$$\begin{aligned}(|a\rangle, |a\rangle) \;&-\; \frac{(|b\rangle, |a\rangle)}{(|b\rangle, |b\rangle)}(|a\rangle, |b\rangle) - \frac{(|a\rangle, |b\rangle)}{(|b\rangle, |b\rangle)}(|b\rangle, |a\rangle) + \\ &+\; \frac{(|a\rangle, |b\rangle).(|b\rangle, |a\rangle)}{(|b\rangle, |b\rangle)^2}(|b\rangle, |b\rangle) \geq 0\end{aligned}$$

$$(|a\rangle, |a\rangle) \geq \frac{|(|a\rangle, |b\rangle)|^2}{(|b\rangle, |b\rangle)}$$

daí decorrendo o resultado.

Essa desigualdade é sempre verificada em $\mathcal{H}$, e na verdade em qualquer espaço linear com produto escalar.

Definimos a norma em $\mathcal{H}$ por

$$||\,|a\rangle\,|| = \sqrt{(|a\rangle, |a\rangle)}$$

para qualquer $|a\rangle$ de $\mathcal{H}$. Essa é a norma do ket $|a\rangle$. A métrica natural desse espaço, ou seja a distância entre dois elementos $|a\rangle$ e $|b\rangle$ de $\mathcal{H}$ é:

$$d(|a\rangle, |b\rangle) = ||\,|a\rangle - |b\rangle\,|| = \sqrt{(|a\rangle - |b\rangle, |a\rangle - |b\rangle)}\,.$$

Também, $\mathcal{H}$ deve ser completo, ou seja, sequências de Cauchy (em relação à métrica natural) de $\mathcal{H}$ devem ser sempre convergentes para pontos de $\mathcal{H}$. Costuma-se exigir também que $\mathcal{H}$ seja **separável**.

Lembremos que o espaço é **separável** se existir uma base enumerável de elementos, do tipo $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \ldots\}$.

Consideremos agora os funcionais lineares e contínuos sobre $\mathcal{H}$, ou seja, funções que levam kets de $\mathcal{H}$ em números complexos. Indicaremos genericamente esses funcionais pelos símbolos "bra" de Dirac, $\langle\psi|$. A linearidade desses funcionais é expressa por

$$\langle\psi|\;(\,z\,|a\rangle + w\,|b\rangle\,) = z\,\langle\psi|a\rangle + w\,\langle\psi|b\rangle\,,$$

para quaisquer $z, w \in \mathbf{C}$, e quaisquer $|a\rangle, |b\rangle \in \mathcal{H}$.

A continuidade de um funcional $\langle\psi|$ é representada pela seguinte condição: se a sequência (qualquer) $\{|a_n\rangle\}$ é convergente para zero em $\mathcal{H}$, isto é, se

$$\lim_{n\to\infty} d(|a_n\rangle, |0\rangle) = \lim_{n\to\infty} ||\,|a_n\rangle - |0\rangle\,|| = \lim_{n\to\infty} ||\,|a_n\rangle\,|| = 0\,,$$

então a sequência de números complexos $\{\langle\psi|a_n\rangle\}$ converge para o número zero,

$$\lim_{n\to\infty}\langle\psi|a_n\rangle = 0\,.$$

Denotaremos $\mathcal{H}'$ o conjunto formado por todos os bras (isto é, todos os funcionais lineares e contínuos sobre $\mathcal{H}$), que chamaremos espaço dual de $\mathcal{H}$. Em seguida, damos também a $\mathcal{H}'$ uma *estrutura linear*, definindo a "adição de bras",

$$(\,\langle\alpha| + \langle\beta|\,)\,|\psi\rangle = \langle\alpha|\psi\rangle + \langle\beta|\psi\rangle\,,$$

para quaisquer $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ e $\langle\alpha|, \langle\beta| \in \mathcal{H}'$, com todas aquelas propriedades verificadas, e a multiplicação de um bra por número complexo,

$$(z\langle\alpha|)\,|\psi\rangle = z\,\langle\alpha|\psi\rangle$$

com aquelas cinco propriedades verificadas também.

Com isso tudo, $\mathcal{H}$ e $\mathcal{H}'$ são espaços vetoriais, e $\mathcal{H}$ é um espaço de Hilbert separável.

Enunciaremos agora um teorema fundamental, que relaciona elementos de $\mathcal{H}$ com elementos de $\mathcal{H}'$.

Teorema da Representação de Riesz À cada elemento $|a\rangle$ de $\mathcal{H}$, está associado um único elemento $\langle a|$ de $\mathcal{H}'$ e, reciprocamente, cada funcional linear e contínuo $\langle a|$ está univocamente associado à um elemento $|a\rangle$, podendo-se escrever

$$\langle a|b\rangle = (|a\rangle, b\rangle)$$

para todo $|b\rangle$ de $\mathcal{H}$.

Note que é exatamente esse produto escalar que estabelece a ponte de ligação entre $\mathcal{H}$ e $\mathcal{H}'$. Nós dizemos que $\mathcal{H}$ e $\mathcal{H}'$ são essencialmente o mesmo espaço, já que o Teorema da Representação de Riesz afirma a existência de uma correspondência um-a-um (isto é, biunívoca) entre elementos dos dois espaços. Indica-se:

$$\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}'$$

(os matemáticos dizem que "$\mathcal{H}$ e $\mathcal{H}'$ são isomorfos").

No entanto, a correspondência $|a\rangle \longleftrightarrow \langle a|$ não é linear, e sim antilinear. Isto é muito importante, vamos observar esta propriedade com cuidado. Vamos tentar responder à seguinte pergunta: qual o bra associado ao ket $z|a\rangle + w|b\rangle$? Retornemos à linguagem do produto escalar por uns instantes. Sabemos que

$$(z_1|a\rangle + z_2|b\rangle, |c\rangle) = (z_1)^* \, (|a\rangle, |c\rangle) + (z_2)^* \, (|b\rangle, |c\rangle) \, .$$

Reescreveremos agora essa igualdade usando os símbolos bra e ket de Dirac lembrando, antes de mais nada, que pelo Teorema de Riesz,

$$(|\alpha\rangle, |\beta\rangle) = \langle \alpha|\beta\rangle \, ;$$

$$\begin{aligned} \langle \, z_1 a + z_2 b \, |c\rangle &= (z_1)^* \, \langle a|c\rangle + (z_2)^* \, \langle b|c\rangle \\ &= \Big((z_1)^* \, \langle a| + (z_2)^* \, \langle b| \Big) |c\rangle \end{aligned}$$

logo o ket $|z_1 a + z_2 b\rangle = z_1 \, |a\rangle + z_2 \, |b\rangle$ corresponde ao bra $\langle z_1 a + z_2 b| = (z_1)^* \, \langle a| + (z_2)^* \, \langle b|$,

$$z_1 \, |a\rangle + z_2 \, |b\rangle \longleftrightarrow (z_1)^* \, \langle a| + (z_2)^* \, \langle b|$$

onde a antilinearidade da associação é evidente.

Os operadores lineares em $\mathcal{H}$,

$$\begin{aligned} A: \, \mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H} \quad &\longrightarrow \quad \mathcal{CD}(A) \subset \mathcal{H} \\ |b\rangle \quad &\longrightarrow \quad |c\rangle = A \, |b\rangle \end{aligned}$$

satisfazem a condição:

$$A \, [z \, |b\rangle + w \, |c\rangle] = z \, A \, |b\rangle + w \, A|c\rangle \, ,$$

para quaisquer $z, w \in \mathbf{C}$ e para quaisquer $|b\rangle, |c\rangle \in \mathcal{H}$.

Uma forma de explicitar a ação do operador é definir sua ação sobre cada um dos elementos de uma base de $\mathcal{H}$. Seja $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \ldots\}$ uma base do espaço de Hilbert, que por simplicidade suporemos ortonormal,

$$\langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij} \, .$$

Qualquer vetor $|b\rangle$ é escrito em termos dessa base, segundo a expansão

$$|b\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \beta_i |u_i\rangle$$

com $\beta_i \in \mathbf{C}$, e temos portanto

$$|c\rangle = A\,|b\rangle = A\sum_{i=1}^{\infty}\beta_i\,|u_i\rangle\,.$$

Se sabemos quanto vale $A\,|u_i\rangle$, então sabemos a ação de A sobre qualquer vetor $|b\rangle$ de $\mathcal{H}$.

Note que na expansão acima para $|b\rangle$, os coeficientes β_i são dados por $\beta_i = \langle u_i|b\rangle$. De fato, tomando o produto escalar da expressão para $|b\rangle$ em termos da base $\{|u_i\rangle\}$ com o vetor $|u_j\rangle$,

$$\langle u_j|b\rangle = \sum_{i=1}^{\infty}\beta_i\langle u_j|u_i\rangle = \sum_{i=1}^{\infty}\beta_i\delta_{ij} = \beta_j\,.$$

Assim,

$$|b\rangle = \sum_i |u_i\rangle\,\underbrace{\langle u_i|b\rangle}_{\beta_i} = \left(\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\right)|b\rangle\,,$$

para qualquer $|b\rangle \in \mathcal{H}$; é por isso que escrevemos:

$$\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = 1$$

expressão essa que chamaremos <u>resolução da identidade</u>.

Retomemos a expansão

$$|c\rangle = \sum_i \beta_i A|u_i\rangle\,.$$

O vetor $|c\rangle$ pode ser escrito, por outro lado,

$$\begin{aligned}|c\rangle = \sum_j \gamma_j\,|u_j\rangle &= \sum_j |u_j\rangle\langle u_j|c\rangle = \\ &= \sum_{i,j} |u_j\rangle\langle u_j|A|u_i\rangle\,\beta_i\end{aligned}$$

ou seja, as componentes γ_j de $|c\rangle$ na base $\{|u_i\rangle\}$ estão ligadas às componentes β_i de $|b\rangle$ na mesma base, por:

$$\gamma_j = \sum_i \langle u_j|A|u_i\rangle\,\beta_i$$

e o operador A é completamente caracterizado na base $\{|u_i\rangle\}$ por uma matriz, de elementos:

$$A_{ij} = \langle u_j|A|u_i\rangle$$

ditos "elementos de matriz" do operador A na base $\{|u_i\rangle\}$.

Há aqui uma sutileza que devemos esclarecer. Na última expansão para $|c\rangle$, a rigor tínhamos:

$$\langle u_j|\left(A|u_i\rangle\beta_i\right)$$

mas omitimos o parênteses, porque há uma simetria, no caso:

$$\left(\langle u_j|A\right)|u_i\rangle = \langle u_j|\left(A|u_i\rangle\right)$$

e podemos escrever a expressão sem parênteses (a igualdade acima pode ser tomada como definição).

Define-se soma e produto de operadores,

$$(A+B)|c\rangle = A|c\rangle + B|c\rangle\,,$$

$$AB|c\rangle = A\left(B|c\rangle\right)\,.$$

O produto de dois operadores em geral <u>não</u> é comutativo, de modo que o comutador dos operadores A e B,

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

em geral não é igual ao operador nulo 0.

Quando $AB = BA = 1$ (onde 1 é o operador identidade, $1|a\rangle = |a\rangle$, para qualquer $|a\rangle \in \mathcal{H}$), dizemos que B é o operador inverso de A (ou vice-versa!), indicando:

$$B = A^{-1}\,.$$

Note que o inverso de um <u>produto</u> de operadores não preserva a ordem desse produto,

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}\,.$$

É bom lembrar que "poucos" operadores têm um inverso. No entanto, à <u>cada</u> operador A é possível associar o <u>operador adjunto</u> de A, definido por

$$\langle c|A^\dagger|b\rangle = \langle b|A|c\rangle^*$$

para quaisquer $|b\rangle, |c\rangle \in \mathcal{H}$.

Esta definição, assim como outras que daremos aqui neste capítulo, supõe(m) que o operador A é limitado.

A qual bra corresponde o ket $A|c\rangle$? Chamemos $|c'\rangle = A|c\rangle$; queremos explicitar a forma de $\langle c'|$. Note que

$$\langle c'|b\rangle = \langle b|c'\rangle^* = \langle b|A|c\rangle^* = \langle c|A^\dagger|b\rangle \,,$$

para qualquer $|b\rangle \in \mathcal{H}$. Vemos portanto que

$$A|c\rangle \longrightarrow \langle C|A^\dagger \,.$$

Há algumas propriedades que podem ser facilmente verificadas:

(i) $(A^\dagger)^\dagger = A \quad ;$

(ii) $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \quad ;$

(iii) $(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger \quad ;$

(iv) $(zA)^\dagger = z^* A^\dagger \quad .$

Por exemplo, verifiquemos (iv). Para quaisquer $|a\rangle, |b\rangle \in \mathcal{H}$,

$$\begin{aligned} \langle a|(zA)^\dagger|b\rangle &= \Big(z\langle b|A|a\rangle\Big)^* = z^*\langle b|A|a\rangle^* \\ &= z^*\langle a|A^\dagger|b\rangle = \langle a|\left(z^*A^\dagger\right)|b\rangle \end{aligned}$$

de onde segue que $(zA)^\dagger = z^* A^\dagger$.

Um operador é dito Hermiteano quando $A = A^\dagger$, e anti-Hermiteano quando $A = -A^\dagger$. Será unitário quando $U^\dagger = U^{-1}$. Novamente chamamos sua atenção para o fato de que essas definições valem apenas para operadores limitados.

Uma classe importante de operadores é a dos operadores de projeção P que são:

(i) idempotentes, $P^2 = P$ (e, por isso, $P^n = P$);

(ii) Hermiteanos, $P = P^\dagger$.

Se P é um operador de projeção, então $1 - P$ também o é. Eis um exemplo especialmente importante desse tipo de objeto:

$$A = |a\rangle\langle a| \,.$$

Isso é realmente um operador, porque leva kets como $|c\rangle$ em

$$A\,|c\rangle = |a\rangle \quad \underbrace{\langle a|c\rangle}_{\text{complexo}}$$

isto é, num ket "proporcional" ao ket $|a\rangle$, ou "na direção" de $|a\rangle$.

E é também auto-adjunto: o adjunto de $|a\rangle\langle b|$ é dado por $|b\rangle\langle a|$, já que

$$\begin{aligned}\langle d|\,(|a\rangle\langle b|)^\dagger\,|c\rangle &= [\langle c|a\rangle\langle b|d\rangle]^* = \langle c|a\rangle^*\,\langle b|d\rangle^* \\ &= \langle a|c\rangle\,\langle d|b\rangle = \langle d|\,(|b\rangle\langle a|)\,|c\rangle\,.\end{aligned}$$

E, além disso, $|a\rangle\langle a|$ é idempotente, se $|a\rangle$ for normalizado, $\langle a|a\rangle$ é igual a um,

$$(|a\rangle\langle a|)^2 = |a\rangle\,\underbrace{\langle a|a\rangle}_{1}\langle a|\,.$$

Por isso, cada termo na resolução da identidade $\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = 1$ é um operador de projeção; a soma, ou seja, a projeção de um vetor "em todas as direções" dá o próprio vetor. Ou, podemos dizer, a soma dos projetores $|u_i\rangle\langle u_i|$ é igual à identidade 1.

Em Mecânica Quântica, as grandezas físicas - usualmente chamadas de <u>observáveis físicos</u>, por estarem associados à observações ou medidas experimentais - são representadas por operadores no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ das funções de onda de quadrado integrável. É importante que tais operadores sejam Hermiteanos, para que tenham autovalores reais e um conjunto completo de autofunções que constituirão uma base para o espaço $\mathcal{H}$. Devemos ter, em especial para o operador Hamiltoniano, que representa a energia,

$$H_{mn} = \langle u_m|H|u_n\rangle = E_n\delta_{mn} = E_n\langle u_m|u_n\rangle\,.$$

O fato de que os autovalores do operador Hamiltoniano são reais é comprovado por

$$\begin{aligned}{E_n}^*\,\delta_{nn} &= \langle u_n|H|u_n\rangle^* = \langle u_n|H^\dagger|u_n\rangle \\ &= \langle u_n|H|u_n\rangle = E_n\,\delta_{nn}\,,\end{aligned}$$

daí decorrendo que $E_n = {E_n}^*$, os autovalores E_n (isto quer dizer: as medidas físicas possíveis de energia!) são reais.

Também, autofunções de H,

$$H\,|u_n\rangle = E_n\,|u_n\rangle$$

correspondentes a diferentes energias devem ser ortogonais. De fato,

$$\langle u_m|H|u_n\rangle = E_n\,\langle u_m|u_n\rangle$$

$$\begin{aligned}\langle u_m|H^\dagger|u_n\rangle &= \langle u_n|H|u_m\rangle = \left(E_m\,\langle u_n|u_m\rangle\right)^* \\ &= E_m\,\langle u_m|u_n\rangle\,.\end{aligned}$$

Subtraindo estas duas últimas igualdades, e como $H = H^\dagger$,

$$0 = (E_m - E_n)\,\langle u_m|u_n\rangle$$

o que mostra que se $E_m \neq E_n$, $|u_m\rangle$ e $|u_n\rangle$ serão ortogonais, uma vez que seu produto escalar é nulo.

Usamos há pouco a expressão

$$H\,|u_n\rangle = E_n\,|u_n\rangle\,.$$

Ela pode ser vista como uma forma abstrata da equação de Schrödinger. O fato das soluções dessa equação corresponderem a um conjunto enumerável de autovalores, isso segue da hermiticidade e compacidade do operador H. Para um operador com essas características, as autofunções $\{\,|u_n\rangle\,\}$ constituem um conjunto completo, ou seja, formam uma base para o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$.

Repetindo: há três importantes propriedades que caracterizam um operador Hermiteano:

(i) seus autovalores são reais;

(ii) suas autofunções são duas a duas ortogonais e

(iii) formam um conjunto completo.

Na verdade, essas são propriedades de um operador auto-adjunto. Como estamos supondo os operadores limitados, um operador Hermiteano é auto-adjunto. Portanto, H é auto-adjunto.

Se, além disso, H for também compacto, seu espectro será discreto.

Impomos, portanto, que medidas físicas sobre o observável energia correspondem aos autovalores de H: $E_1, E_2, \ldots$, sendo que nenhum outro valor poderia ser medido além desses. Enfatizando: essas são os únicos valores de energias possíveis de serem medidos. Os auto-estados $|u_n\rangle$ representam abstratamente os estados físicos do sistema quântico.

Até agora só tratamos de estados estacionários (isto é, que não mudam com o tempo), soluções da equação de Schrödinger independente do tempo, mas podemos incluir em H estados que evoluem temporalmente, juntamente com aqueles auto-estados de H, ditos puros, estacionários, e mais estados estacionários de mistura, escritos como combinações lineares dos auto-estados $|u_i\rangle$ de H. Na linguagem de funções de onda, a equação de Schrödinger dependente do tempo é escrita:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi_n(x,t) + V(x,t)\,\Psi_n(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_n(x,t)\,.$$

Fazemos a separação de variáveis (a ser visto com detalhes em Métodos de Física Teórica II)

$$\Psi_n(x,t) = \psi(x)\,T(t)\,,$$

que fornece

$$\begin{aligned}\Psi_n(x,t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,\psi_n(x)\\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,\Psi_n(x,0) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\Psi_n(x,0)\,.\end{aligned}$$

Nesta expressão, aparece uma exponencial do operador Hamiltoniano H, ela é definida assim:

$$\begin{aligned}e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\psi_n &= \left[1 - \frac{i}{\hbar}tH + \frac{1}{2!}\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)^2 + \ldots\right]\psi_n\\ &= \left[1 - \frac{i}{\hbar}tE_n + \frac{1}{2!}\left(-\frac{it}{\hbar}\right)^2 {E_n}^2 + \ldots\right]\psi_n\end{aligned}$$

sendo que na última passagem usamos que $H\psi_n = E_n\psi_n$.

Escreve-se também

$$\varphi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\varphi(0)$$

logo

$$\varphi'(t) = -\frac{i}{\hbar}\,H\,\varphi(t)$$

pois

$$\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{iH}{\hbar} \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\varphi(0)}_{\varphi(t)} .$$

Colocando em termos da notação de Dirac,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}|t\rangle &= -\frac{i}{\hbar} H|t\rangle \\ |t\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|0\rangle . \end{aligned}$$

Também,

$$e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|u_n\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|u_n\rangle$$

e se desejamos descrever um estado $|t\rangle$ em termos da base de estados estacionários $|u_n\rangle$,

$$|t=0\rangle = \sum_n |u_n\rangle \underbrace{\langle u_n|t=0\rangle}_{\gamma_n} = \sum_n \gamma_n |u_n\rangle$$

$$\begin{aligned} |t\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|t=0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\sum_n \gamma_n|u_n\rangle \\ &= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\gamma_n|u_n\rangle . \end{aligned}$$

Ainda com relação à evolução temporal, note-se a conservação da norma de um vetor de estado,

$$\begin{aligned} \|\,|t\rangle\,\|^2 &= \langle t\rangle = \sum_n \Big|\underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}}_{\text{fase}}\gamma_n\Big|^2 \\ &= \sum_n |\gamma_n|^2 = \langle t=0|t=0\rangle = \|\,|t=0\rangle\,\|^2 . \end{aligned}$$

A variável H é especialmente importante porque caracteriza a evolução temporal do sistema: ela define a dinâmica da teoria.

O espaço $\mathcal{H} = \{|\ \rangle\}$ de "kets" constitui dessa forma o "substrato cinemático", o "palco" onde se desenvolve o "espetáculo" da teoria quântica. Esses "kets", estacionários ou não, representam *estados físicos*.

A ligação desses estados físicos com medidas sobre várias grandezas físicas foi estabelecida por Max Born em 1926, consistindo um ponto fundamental da atual interpretação da teoria quântica (conhecida como interpretação de Copenhagen). Dissemos que a energia de um sistema podia ser apenas um daqueles valores E_1, E_2, ... Como se poderia caracterizar um estado qualquer do espaço de Hilbert em termos da energia?

Sabemos que

$$E_n = \langle u_n | H | u_n \rangle \,,$$

com $\langle u_n | u_n \rangle = 1$ (estado normalizado). Poderíamos fazer:

$$\overline{E_a} = \langle a | H | a \rangle$$

se $\langle a | a \rangle = 1$, e com isso, expandindo

$$|a\rangle = \sum_n \alpha_n \, |u_n\rangle$$

(supomos que $\sum_n |\alpha_n|^2 = 1$).

Então,

$$\begin{aligned} \overline{E_a} &= \langle a | H | a \rangle = \sum_{n,n'} \underbrace{\langle u_{n'} | H | u_n \rangle}\, E_n \, \delta_{n,n'} \, {\alpha_{n'}}^* \, \alpha_n \\ &= \sum_n |\alpha_n|^2 \, E_n \,. \end{aligned}$$

Quando $|a\rangle = |u_n\rangle$, apenas um dos α_n é 1, os outros são nulos. Em geral, $\overline{E_a}$ é uma <u>média ponderada</u> dos autovalores E_n, com os pesos da ponderação sendo ${\alpha_n}^2$. Note bem, o valor $\overline{E_a}$ pode não corresponder a nenhuma das medidas da energia. Born propôs que os pesos ${\alpha_n}^2$ representassem a <u>probabilidade</u> de, numa medida da energia, obtermos o valor E_n. Se o estado $|a\rangle$ não for normalizado, calculamos $\overline{E_a}$ do seguinte modo:

$$\overline{E_a} = \frac{\langle a | H | a \rangle}{\langle a | a \rangle} \,.$$

Essa grandeza é chamada de <u>valor esperado</u> de H no estado $|a\rangle$, e corresponde à média de um número muito grande de medidas de energia, feitas sempre sobre o estado $|a\rangle$.

O grau de indefinição de energia de um estado $|a\rangle$ é medido pelo desvio padrão σ_E,

$$\begin{aligned}
{\sigma_E}^2(|a\rangle) &= \overline{(E^2)}_a - \overline{E}^2{}_a \\
&= \sum_n |\alpha_n|^2 {E_n}^2 - \sum_{n,n'} |\alpha_n|^2 |\alpha_{n'}|^2 E_n E_{n'} \\
&= \langle a|H^2|a\rangle - \langle a|H|a\rangle^2 .
\end{aligned}$$

Essa quantidade é maior ou igual a zero, pois da desigualdade de Schwarz,

$$| \langle a|H|a\rangle |^2 \leq \underbrace{\langle a|a\rangle}_{1} . \langle a| \underbrace{H^\dagger}_{=H} Ha\rangle = \langle a|H^2|a\rangle ,$$

logo

$${\sigma_E}^2 \geq 0 .$$

O que significa a igualdade ${\sigma_E}^2 = 0$? Evidentemente, se não há desvio, isso deve significar que não há indefinição na energia. Vamos ver o que se pode encontrar explicitamente.

$$\sigma_E(|a\rangle) = 0 \Longrightarrow \langle a|H^2|a\rangle = \langle a|H|a\rangle^2 .$$

Vamos escrever $H|a\rangle$ como uma soma de dois termos, uma componente "na direção de $|a\rangle$", e outra ortogonal a essa. Isto é conseguido com o auxílio dos operadores de projeção,

$$P_a = |a\rangle\langle a| , \quad Q = 1 - P = 1 - |a\rangle\langle a| .$$

Note que $PQ|\ \rangle = QP|\ \rangle = 0$, para qualquer ket $|\ \rangle$ de $\mathcal{H}$. Ou seja, esses projetores são excludentes: projetam em direções perpendiculares.

$$\begin{aligned}
H|a\rangle &= PH|a\rangle + QH|a\rangle \\
&= |a\rangle\langle a|H|a\rangle + QH|a\rangle ,
\end{aligned}$$

$$\langle a|H^2|a\rangle = \langle a|H|a\rangle \langle a|H|a\rangle + \langle a|HQH|a\rangle .$$

Como $\langle a|H^2|a\rangle = \langle a|H|a\rangle^2$,

$$\begin{aligned}
0 &= \langle a|HQH|a\rangle = \langle a|H^\dagger Q^2 H|a\rangle \\
&= \langle a|H^\dagger Q^\dagger QH|a\rangle \\
&= ||\, QH|a\rangle \,||^2
\end{aligned}$$

mas, como a norma é positivo-definida,

$$QH|a\rangle = 0$$

ou seja,

$$H|a\rangle = PH|a\rangle = |a\rangle\langle a|H|a\rangle\ .$$

Esta relação pode ser escrita:

$$H|a\rangle = \underbrace{\langle a|H|a\rangle}_{\text{número real}} |a\rangle$$

o que revela que $|a\rangle$ é autovetor de H com autovalor $\langle a|H|a\rangle$, o que seria de se esperar. Isto significa, na verdade, que $|a\rangle$ deve ser um dos $|u_n\rangle$, que havíamos chamado de "auto-estado" da energia. Nesse tipo de estado, de fato não há indefinição de energia, a energia vale E_n (autovalor correspondente a $|u_n\rangle$).

Pode-se estender essas idéias para outras variáveis dinâmicas. Se A for uma variável dinâmica, medidas de A resultarão em valores a_n, $n = 1, 2, \ldots$, onde

$$A|a_n\rangle = a_n\,|a_n\rangle\ .$$

Dado que o sistema se encontra no estado $|a\rangle$, a probabilidade de uma medida de A fornecer a_n é:

$$|\,\langle a_n|a\rangle\,|^2\ .$$

Quando acontecer:

$$A\,|a_{n,i}\rangle = a_n\,|a_{n,i}\rangle$$

para vários índices i $(i = 1, 2, \ldots, N)$, dizemos que o autovalor a_n é N vezes degenerado. O conjunto de autovetores correspondente,

$$\{\,|a_{n,i}\rangle\,\}$$

pode ser ortonormalizado formando uma base para o subespaço associado ao autovalor a_nR,

$$\langle a_{n,i}|a_{n,j}\rangle = \delta_{i,j}\ ,$$

Se $A\,|a\rangle = a_n\,|a\rangle$, então qualquer autovetor deste subespaço pode ser desenvolvido assim:

$$|a\rangle = \sum_{i=1}^{N} \alpha_{n,i}\,|a_{n,i}\rangle = \sum_{i=1}^{N} |a_{n,i}\rangle\,\langle a_{n,i}|a\rangle\ .$$

ATIVIDADES

1. Mostre que $\langle a|H|a\rangle$ é um número real, quando $|a\rangle$ for um estado de mistura,

$$|a\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_n \, |u_n\rangle$$

2. Mostre que a evolução temporal de um estado quântico qualquer, $|\psi\rangle$, não muda a norma desse vetor.

3. Mostre que o autovalor de um operador Hermiteano A é real.

4. Qual o bra associado ao ket $A|c\rangle$?

5. Mostre que $PQ = QP = 0$ sendo $P = |a\rangle \langle a|$, $Q = 1 - P$, com $\langle a|a\rangle = 1$.

COMENTÁRIO SOBRE AS ATIVIDADES

Para resolver a primeira questão, lembre-se que os $|u_n\rangle$ formam um conjunto ortonormalizado, associados à autovalores reais E_n. Os α_n em geral são números complexos. Na segunda questão, você trabalhará com o operador evolução temporal e^{iHt} onde o Hamiltoniano H é auto-adjunto. Quanto às questões terceira e quarta, basta usar as propriedades básicas envolvendo bras e kets. Uma dica para a última questão: mostrar que $PQ = 0$ significa que $PQ\,|\psi\rangle = 0$ para qualquer $|\psi\rangle$. Basta então substituir $P = |a\rangle \langle a|$ e $Q = 1 - |a\rangle \langle a|$ nos lugares de P e Q, e prosseguir com o cálculo.

CONCLUSÃO

A notação de Dirac permite expressar de modo compacto as relações entre os operadores da Mecânica Quântica e as funções de onda. Ela se baseia sobretudo na forma do produto escalar, que permite estabelecer uma relação entre as duas classes de objetos, bras e kets.

RESUMO

Nesta aula, foram apresentadas as propriedades de bras e kets, bem como a forma como operadores atuam sobre esses objetos, em expressões típicas da Física Quântica. Discutiu-se, particularmente, os operadores auto-adjuntos e os operadores de projeção, e sua representação em termos de bases ortonormais de kets.

PRÓXIMA AULA

Na próxima aula estudaremos propriedades de séries infinitas, sua convergência, e a técnica de obter expansões em série para uso em vários problemas físicos.

REFERÊNCIAS

COHEN-TANNOUDJI, Claude; DIU, Bernard; LALOE, Frank. Quantum Mechanics. New York: J. Wiley, 2006.

DIRAC, Paul. The Principles of Quantum Mechanics. Oxford: Clarendon Press, 1967.