

ÁLGEBRA LINEAR E MECÂNICA QUÂNTICA

R. THIBES *

Resumo

Uma das mais importantes aplicações da Álgebra Linear na Ciência Básica Moderna é sem dúvida na Mecânica Quântica. A Mecânica Quântica por sua vez, constitui uma das grandes áreas centrais de conhecimento da Física Contemporânea, sendo tradicionalmente considerada de difícil compreensão devido à matemática envolvida. Neste trabalho apresentamos os conceitos matemáticos essenciais à compreensão da Mecânica Quântica sob o ponto de vista da Álgebra Linear. Estruturas algébricas básicas tais como grupos, anéis, corpos e álgebras são definidas, exemplificadas e contextualizadas na Mecânica Quântica. Em particular investigamos algumas propriedades de espaços vetoriais sobre o corpo dos complexos, bem como transformações lineares, operadores, autovetores e autovalores. Discutimos a representação de sistemas físicos na Mecânica Quântica, o papel do observador, conceito de medida e a evolução dinâmica de vetores de estado (representação de Schrödinger) ou de operadores (representação de Heisenberg). Enfatizamos a necessidade de uma maior interação entre Matemática e Física como diferentes áreas de conhecimento e de diferentes métodos de trabalho mas com uma vasta intersecção entre seus objetos de estudo. Procuramos fornecer a graduandos em Matemática uma base de conhecimento sobre o que é a Mecânica Quântica. Com certeza a Mecânica Quântica é um terreno fértil para aplicação de vários conceitos matemáticos abstratos, em particular da Álgebra, coroando com sucesso seu método axiomático dedutivo.

1 Introdução

A base para um bom entendimento da Mecânica Quântica encontra-se numa sólida compreensão de conceitos matemáticos, principalmente de Álgebra Linear. Neste mini-curso abordaremos a maior parte de tais conceitos matemáticos necessários à compreensão da Mecânica Quântica. A Mecânica Quântica é uma das principais teorias da física contemporânea, desenvolvida no século XX em conjunto por grupos independentes de vários pesquisadores. Seu principal escopo de atuação compreende o estudo do comportamento de matéria e energia em escalas atômicas e subatômicas. Grande partes das modernas tecnologias de nosso mundo atual é baseada na Mecânica Quântica. Apesar do enorme e inegável sucesso desta teoria na compreensão, descrição e previsão de vários fenômenos, e de sua atual aceitação incontestável em seu domínio de validade por toda a comunidade científica, em geral a Mecânica Quântica é de difícil compreensão fora da comunidade de físicos. Tal fato se deve a pelos menos dois aspectos: (i) as bases da Mecânica Quântica encontram-se em teorias matemáticas de nível intermediário e avançado e (ii) as interpretações dos resultados da Mecânica Quântica são envoltas pela mídia em conceitos “filosóficos” e “exotéricos” e divulgadas erroneamente, de forma bastante distorcida, para o público leigo em geral. Considerando um público alvo de estudantes de matemática, o primeiro aspecto acima mencionado deixa de existir, enquanto o segundo, por ser um pouco uma consequência do primeiro, pode ser, pelo menos parcialmente, remediado.

Usualmente espera-se que ao final de um curso de graduação em matemática, bacharelado ou licenciatura, o graduado domine amplamente os conceitos matemáticos abordados nas seções 2 a 7 do presente mini-curso. Contudo, devido a problemas de notação e outras dificuldades de comunicação entre a comunidades de físicos e matemáticos (além do falso “exoterismo” acima mencionado que parece permear a Mecânica Quântica), é comum que muitos graduados em matemática mantenham um total desconhecimento desta importante área da física contemporânea, aqui abordada nas seções 8 a 10. Um dos objetivos do presente mini-curso é reverter tal quadro, proporcionando ao futuro matemático uma oportunidade de ampliar seus horizontes penetrando num

*Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, DEBI, BA, Brasil, thibes@uesb.edu.br

rico e vasto campo da ciência moderna no qual poderá aplicar e exemplificar seus conhecimentos abstratos e eventualmente contribuir com novas idéias. Para o futuro professor de matemática, é essencial conhecer uma das mais belas aplicações da Matemática Moderna que é a Mecânica Quântica, com o intuito de saber por que ensinar uma matemática cada vez mais abstrata. Por exemplo, quando alunos de ensino médio perguntam a seus professores de matemática para que servem conceitos tais como números complexos e matrizes, muitos professores ficam simplesmente sem saber o que responder. Entendendo um pouco da Mecânica Quântica tal resposta pode ser fornecida pelo professor com convicção e conhecimento de causa, podendo inclusive aprofundar sua resposta para alunos porventura mais interessados e talvez potenciais futuros matemáticos ou físicos.

O minicurso encontra-se subdividido em três partes principais. Na Parte I, constituída das seções **2 a 4**, uma visão geral sobre a base conceitual da Álgebra Linear é abordada. Procuramos definir todos os conceitos utilizados a partir do zero, bem como demonstrar os principais resultados. Na Parte II, seções **5 a 7**, aprofundamos um pouco na Álgebra Linear propriamente dita, estudando álgebras, operadores, autovalores e autovetores. Em geral focamos em espaços vetoriais complexos de dimensão finita e infinita com o objetivo de aplicações em Mecânica Quântica. Por fim na Parte III, seções **8 a 10**, mostramos como a Mecânica Quântica utiliza o formalismo da Álgebra Linear para a descrição de sistemas físicos, em particular vemos como extrair informação da teoria a ser confrontada com observações (previsões). Nesta última parte abordamos também a dinâmica quântica e finalizamos com alguns exemplos de aplicações da Mecânica Quântica para o estudo de sistemas simples relevantes.

Uma atenção especial à notação será dispensada. Isto é, os conceitos matemáticos introduzidos nas partes I e II utilizarão a mesma notação da Mecânica Quântica abordada na parte III. Em particular a notação de *bra-c-ket* de Dirac será introduzida logo na definição de espaços vetoriais, aliás antes ainda, na definição de grupo abeliano. Sempre que possível as definições e conceitos trabalhadas nas partes I e II serão imediatamente exemplificadas conforme serão posteriormente aplicadas na Mecânica Quântica. Embora seja esperada uma certa dose de maturidade e experiência matemática (a nível de graduação) dos participantes, ressaltamos que o mini-curso é totalmente auto-consistente no sentido de que todos os conceitos utilizados serão devidamente definidos e exemplificados.

2 Estruturas Algébricas

A área da matemática que se ocupa do estudo e classificação de estruturas algébricas é a *álgebra*. Existem basicamente duas abordagens principais utilizadas pela álgebra: (i) Dada uma estrutura algébrica pronta, estudamos suas propriedades. (ii) A partir de estruturas algébricas mais simples construímos outras mais complexas.

Como exemplos de importantes estruturas estudadas pela Álgebra, podemos citar: Conjuntos numéricos tais como $\mathbb{Z}$ ou $\mathbb{R}$ com operações entre seus elementos tais como soma ou multiplicação; conjuntos de entes (mais) abstratos tais como matrizes, funções, operadores, etc., munidos de operações; conjuntos de transformações aplicadas sobre um sistema físico, etc. No espírito da abordagem (i) acima, podemos selecionar como objeto de estudo, digamos, o conjunto dos números reais e estudar seu comportamento frente a várias operações (adição, multiplicação, potenciação, etc.) Já como exemplo da abordagem (ii) podemos, a partir do conjunto dos números naturais construir sucessivamente os conjuntos dos inteiros, racionais e reais.

A nomenclatura da álgebra envolve por exemplo: grupos - módulos - anéis - espaços vetoriais - corpos - álgebras. A Mecânica Quântica moderna é construída sobre tais estruturas matemáticas. Em breve veremos que o conjunto dos estados físicos de um sistema constitui um espaço vetorial sobre o corpo dos complexos e sobre o qual construímos uma álgebra de operadores. Definiremos a seguir os conceitos de grupos, anéis, corpos, espaços vetoriais.

2.1 Grupos

Uma das estruturas mais simples da álgebra é constituída pelo conceito de grupo. A idéia de estrutura matemática de grupo constitui o pilar de estruturas algébricas mais complexas e se encontra presente em praticamente todas as áreas da matemática.

Definição 2.1. Dizemos que um conjunto não vazio $\mathbb{G}$, munido de uma operação binária (ou lei de composição interna) $*$ fechada é um grupo se são válidas as seguintes propriedades:

G1) $\forall a, b, c \in \mathbb{G}$ temos que $(a * b) * c = a * (b * c)$ (associatividade)

G2) $\exists e \in \mathbb{G}$ tal que $e * a = a * e = a$, $\forall a \in \mathbb{G}$ (elemento neutro)

G3) $\forall a \in \mathbb{G}$, $\exists a^{-1} \in \mathbb{G}$ tal que $a^{-1} * a = a * a^{-1} = e$ (simétrico)

A partir desta definição, imediatamente podemos demonstrar inúmeras propriedades interessantes. Vejamos algumas:

- 1) O elemento neutro é único.
- 2) Se para algum $a \in G$ temos que $a * a = a$ então $a = e$.
- 3) O simétrico é único.
- 4) $\forall a \in \mathbb{G}, (a^{-1})^{-1} = a$.
- 5) $a * b = a * c \Rightarrow b = c, b * a = c * a \Rightarrow b = c$; $\forall a, b, c \in G$ (leis de corte).

Em geral a operação de grupo pode ser não-comutativa. No caso particular de valer a comutatividade denominamos o grupo de *abeliano*. Isto é:

Definição 2.2. Dizemos que um grupo $\mathbb{G}$ é um grupo abeliano ou comutativo quando $\forall a, b \in \mathbb{G}$ temos $a * b = b * a$.

Ou seja, num grupo abeliano a operação do grupo é, por definição, comutativa.

Notação para Grupo Abeliano

No caso de grupos abelianos, denotaremos a operação do grupo por “+” e um elemento genérico do grupo por $|a\rangle$ ¹. Explicitamente, para um grupo abeliano $\mathbb{G}$ são válidas as seguintes propriedades:

Dados quaisquer elementos $|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle$ do grupo:

G0) $|a\rangle + |b\rangle \in \mathbb{G}$.

G1) $(|a\rangle + |b\rangle) + |c\rangle = |a\rangle + (|b\rangle + |c\rangle)$.

G2) Existe um elemento especial $0 \in \mathbb{G}$, denominado elemento nulo, tal que: $0 + |a\rangle = |a\rangle$, $\forall |a\rangle \in \mathbb{G}$.

G3) $\exists (-|a\rangle) \in \mathbb{G}$ com $(-|a\rangle) + |a\rangle = 0$.

G4) $|a\rangle + |b\rangle = |b\rangle + |a\rangle$.

O que muda nesta relação de condições de grupo acima em relação à anterior? Observe que G1, G2 e G3 são exatamente as mesmas condições anteriores expressas com diferente notação. G0 estava implícita quando dissemos que a operação de grupo deve necessariamente ser fechada. E finalmente G4 é exclusiva para grupo abeliano.

2.2 Anéis e Corpos

Quando falamos em grupo, estamos considerando um conjunto com apenas uma operação matemática. Por exemplo o conjunto dos números inteiros com a operação usual de soma. Para incluirmos uma segunda operação, digamos a multiplicação de números inteiros, precisamos de uma outra estrutura algébrica. Anéis e corpos constituem exemplos de estruturas algébricas com duas operações.

Definição 2.3. Um anel $(A, +, \cdot)$ é um conjunto A munido de duas operações fechadas “+” e “.” satisfazendo:

A1) $(A, +)$ é um grupo abeliano

A2) $(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c)$ ²

A3) $a \cdot (b + c) = a \cdot b + a \cdot c$ e $(a + b) \cdot c = a \cdot c + b \cdot c$

A4) $1 \cdot a = a \cdot 1$

¹Esta é a famosa notação de Dirac para espaços vetoriais que nos será muito útil mais adiante. Os elementos de um grupo abeliano assim representados posteriormente constituirão os vetores de um espaço vetorial

²Apesar de A ser um grupo abeliano, a notação de Dirac será reservada apenas para os vetores, os elementos do corpo não serão denominados vetores, mas sim “escalares”.

Usualmente, denominamos as operações “+” e “.” simplesmente de “soma” e “multiplicação”. Observe que a operação de soma no anel, por definição, é sempre comutativa. Se além da soma também a multiplicação for comutativa, dizemos que o anel é comutativo.

Definição 2.4. *Um anel $(A, +, \cdot)$ no qual $\forall a, b \in A, a \cdot b = b \cdot a$ é dito um anel comutativo.*

Um bom modelo de anel é o conjunto dos números inteiros com as operações de soma e multiplicação. Observando as propriedades A1-A4 de um anel acima listadas constatamos uma assimetria entre as duas operações. Se por um lado o simétrico ou inverso aditivo sempre existe, o mesmo não pode ser dito sobre um inverso multiplicativo. Por exemplo dado um número inteiro qualquer, digamos 5, seu simétrico é o -5 , mas não temos um inteiro que multiplicado por 5 resulte na unidade. Se exigirmos a existência do inverso multiplicativo³ e a comutatividade da segunda operação “.”, generalizamos o conceito de anel para o de *corpo*.

Definição 2.5. *Um corpo é um anel comutativo com inverso multiplicativo. Ou seja, $(F, +, \cdot)$ é um corpo se e só se $(F, +, \cdot)$ é um anel comutativo tal que*

$$\forall x \neq 0 \in F, \exists x^{-1} \in F, \text{ tal que } x \cdot x^{-1} = 1. \quad (2.1)$$

Dois exemplos de corpos muito importantes em matemática e física são os corpos dos números reais e dos números complexos.

3 Espaços Vetoriais

O que é exatamente um vetor? Essa é uma pergunta bastante capiciosa, dependendo do contexto mais de uma resposta satisfatória é possível. No nosso contexto um vetor é um elemento de um espaço vetorial, abaixo definido. Espaços vetoriais representam uma generalização do espaço das “flecinhas” (aquelas que tinham “módulo”, “direção” e “sentido”, lembra?) do $\mathbb{R}^2$ e do $\mathbb{R}^3$.

Definimos *espaço vetorial* a partir da seguinte “receita” onde mencionamos os “ingredientes” que são os objetos matemáticos constituintes de um espaço vetorial e o “modo de fazer” que dita o comportamento (propriedades) destes objetos:

Definição 3.1. *Receita para Construção de um Espaço Vetorial:*

- (i) “ingredientes”:
 - um corpo F (duas operações implícitas)
 - um conjunto V de objetos, denominados vetores, representados por $|a \rangle, |b \rangle, |x \rangle, |y \rangle, |z \rangle, |\psi \rangle, |+ \rangle, |- \rangle$, etc., munido de uma operação binária “+” (soma de vetores).
 - uma operação “.”⁴: $F \times V \rightarrow V$ definindo uma multiplicação de “escalar” por vetor.
- (ii) “modo de fazer”:
 - Dados quaisquer $\alpha, \beta \in F, |a \rangle, |b \rangle \in V$ e sendo $1 \in F$ o elemento neutro de F , são válidas as propriedades:
 - V1) V é um grupo abeliano sob a operação de soma de vetores.
 - V2) $\alpha(\beta|a \rangle) = (\alpha\beta)|a \rangle$
 - V3) $1|a \rangle = |a \rangle$
 - V4) $\alpha(|a \rangle + |b \rangle) = \alpha|a \rangle + \alpha|b \rangle$
 - V5) $(\alpha + \beta)|a \rangle = \alpha|a \rangle + \beta|a \rangle$

A definição de espaço vetorial é bastante geral, englobando desde as antigas “flecinhas” até por exemplo funções consideradas como vetores. Trata-se de uma estrutura rica em que encontram-se envolvidos dois conjuntos (escalares e vetores) e quatro operações (duas no corpo, soma de vetores entre si e multiplicação de escalar por vetor). Os casos mais comuns em física são os de espaços vetoriais sobre os corpos dos reais e dos complexos, denominados respectivamente espaço vetorial real e espaço vetorial complexo. Vejamos alguns exemplos e contra-exemplos:

³Com exceção apenas do zero.

⁴Muitas vezes esta operação será representada simplesmente pela justaposição dos elementos do corpo e do espaço vetorial.

Exemplo 3.1. O conjunto das “setinhas” no plano, com a regra usual da soma do paralelogramo, forma um espaço vetorial sobre os reais. As “setinhas” constituem segmentos de reta orientados e são os vetores propriamente ditos. A soma entre dois ou mais vetores é obtida equivalentemente pelas tradicionais regra do paralelogramo ou da poligonal. A multiplicação de um segmento por um vetor é tal que a orientação espacial (direção) do segmento de reta é mantida, sendo alterado apenas seu tamanho (módulo), o sentido é mantido ou alterado dependendo do número real multiplicante ser positivo ou negativo. Trata-se de um espaço vetorial real de dimensão dois isomorfo ao $\mathbb{R}^2$ sobre $\mathbb{R}$.

Exemplo 3.2. $\mathbb{R}$ é um espaço vetorial sobre $\mathbb{R}$. Este é um exemplo trivial que nos mostra que, dependendo do contexto, um simples número real pode ser considerado um vetor.

Exemplo 3.3. $\mathbb{C}$ é um espaço vetorial sobre $\mathbb{R}$.

Exemplo 3.4. $\mathbb{R}$ não é um espaço vetorial sobre $\mathbb{C}$. Se multiplicarmos um elemento do corpo (número complexo) por um elemento de V (número real) não necessariamente obtemos outro elemento de V .

Exemplo 3.5. O conjunto de todas as matrizes quadradas de entradas reais não forma um espaço vetorial. (É necessário fixar a dimensão e definir o corpo.)

Exemplo 3.6. Considere a equação diferencial ordinária de segunda ordem $\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0$. O conjunto de todas as suas soluções constitui um espaço vetorial.

3.1 Espaços Vetoriais na Mecânica Quântica

Em Mecânica Quântica, o estado de um sistema físico será representado por um vetor abstrato, pertencente a um espaço vetorial complexo. Vejamos com mais detalhes dois exemplos muito importantes:

(a) Espaço Vetorial $\mathbb{C}^n$

Consideremos os vetores matrizes colunas constituídas por entradas complexas

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \quad |b\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

Definimos a adição entre dois vetores $|a\rangle$ e $|b\rangle$, e a multiplicação por escalar (número complexo) α por:

$$|a\rangle + |b\rangle = \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \\ \vdots \\ a_n + b_n \end{pmatrix}, \quad \alpha |a\rangle = \begin{pmatrix} \alpha a_1 \\ \alpha a_2 \\ \vdots \\ \alpha a_n \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

É imediato verificar que o conjunto das matrizes colunas acima definido constitui um espaço vetorial sobre o corpo dos complexos.

(b) Espaço Vetorial de Funções

Como segundo exemplo de espaço vetorial muito importante em Mecânica Quântica, consideremos o conjunto de funções complexas de variável real, definidas num intervalo real $[a, b]$.

$$\psi : [a, b] \rightarrow \mathbb{C} \quad (3.4)$$

Ou seja ψ é uma função matemática usual, que associa um número complexo $\psi(x)$ a cada número real x pertencente ao intervalo $[a, b]$. Construímos um espaço vetorial a partir do conjunto de todas as funções ψ , consideradas como vetores, definindo de forma natural:

$$(\psi_1 + \psi_2)(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x) \quad \text{e} \quad (\alpha\psi)(x) = \alpha\psi(x), \quad (3.5)$$

Aqui α é um número complexo, ou seja, um elemento do corpo $\mathbb{C}$, portanto um escalar.

Com as definições das operações acima, todas as propriedades de espaço vetorial podem ser verificadas.

3.2 BASE

Um conceito bastante útil e prático para lidarmos com espaços vetoriais é o de *base*. Conhecendo uma base de um espaço vetorial, qualquer vetor poderá ser nela expresso.

Definição 3.2. *Uma base de um espaço vetorial V é um conjunto B de vetores linearmente independentes que varre todo o espaço V . Ou seja, qualquer vetor de V pode ser expresso como combinação linear dos elementos de B .*

Dependendo da base ser finita ou infinita, o espaço vetorial é dito correspondentemente de dimensão finita ou infinita.

Vejamos alguns exemplos:

Exemplo 3.7. *Considerando $\mathbb{C}$ como um espaço vetorial sobre $\mathbb{R}$ os elementos 1 e i formam uma base. Contudo se considerarmos $\mathbb{C}$ sobre $\mathbb{C}$ temos um espaço vetorial unidimensional pois agora basta tomarmos 1 por exemplo como base.*

O exemplo (3.7) acima mostra que um mesmo conjunto de vetores pode ter diferentes dimensões conforme o corpo escolhido (naturalmente levando a dois espaços vetoriais diferentes.)

Exemplo 3.8. - A base canônica para $\mathbb{C}^n$ é:

$$|e_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |e_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \dots, \quad |e_n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Qualquer vetor de $\mathbb{C}^n$ pode ser expresso como uma combinação linear da base canônica de forma única. Dado $|a\rangle \in \mathbb{C}^n$, temos

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \dots + a_n \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

3.3 Produto Interno

Definimos o produto interno num espaço vetorial complexo V associando um número complexo $\langle a|b\rangle$ a cada par de vetores $|a\rangle, |b\rangle$ tal que:

PI 1) $\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^*$

PI 2) $\langle a|(\beta|b\rangle + \gamma|c\rangle) = \beta\langle a|b\rangle + \gamma\langle a|c\rangle$

PI 3) $\langle a|a\rangle \geq 0$, $\langle a|a\rangle = 0$ se e somente se $|a\rangle = 0$

Em PI 1 acima, o asterisco representa conjugação complexa. Atenção ao detalhe da notação utilizada, o produto interno é uma operação $g : V \times V \rightarrow \mathbb{C}$

$$g(|a\rangle, |b\rangle) = \langle a|b\rangle \quad (3.8)$$

Observe que o produto interno acima definido não é bilinear, mas sim *sesquilinear*. Ou seja, (PI 2) acima garante a linearidade no segundo argumento.

Nos dois exemplos específicos de espaços vetoriais complexos da Mecânica Quântica anteriormente considerados, definimos assim o produto interno:

(a) Espaço vetorial $\mathbb{C}^n$

Dadas duas matrizes colunas de entradas complexas:

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \quad |b\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

temos

$$\langle a|b \rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \dots + a_n^* b_n \quad (3.10)$$

Ou seja, a partir de dois vetores calculamos um escalar. As propriedades PI1-PI3 podem ser explicitamente verificadas.

(b) Espaço vetorial de funções complexas

Dadas duas funções complexas de variável real:

$$|\phi \rangle = \phi(x) \quad \text{e} \quad |\psi \rangle = \psi(x) \quad (3.11)$$

definidas no intervalo $[a, b]$, construímos

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int_a^b dx \phi^*(x) \psi(x). \quad (3.12)$$

Através da integração obtemos um número complexo a partir de duas funções. Um certo cuidado em relação à convergência deve ser tomado aqui. Devemos restringir nosso espaço de funções de forma que a integral acima exista, modificando um pouco o espaço vetorial inicial. Para ser um pouco mais preciso, devemos exigir que $\phi, \psi \in L_2(a, b)$, ou seja o espaço de funções quadraticamente integráveis, a seguir definido.

3.4 Espaço das Funções Quadraticamente Integráveis

Uma função $\psi : [a, b] \rightarrow \mathbb{C}$ é dita quadraticamente integrável se a integral

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_a^b dx \psi^*(x) \psi(x) \quad (3.13)$$

existir. O espaço das funções quadraticamente integráveis definidas no intervalo $[a, b]$ é um espaço vetorial, comumente representado por $L_2(a, b)$. Nesse caso, se $\phi, \psi \in L_2(a, b)$, a integral (3.12) sempre converge.

Finalizamos esta seção com duas definições importantes:

Definição 3.3. *Um espaço vetorial com produto interno, completo, é dito um espaço de Hilbert.*

Definição 3.4. *Um espaço vetorial normado completo é denominado um espaço de Banach.*

Como todo espaço vetorial com produto interno é normado (pois o produto interno induz naturalmente uma norma) vemos que todo espaço de Hilbert é também um espaço de Banach. Contudo é possível definir uma norma sem referência a um produto interno e existem espaços de Banach que não são de Hilbert.

4 Transformações Lineares

Para relacionarmos vetores de diferentes espaços vetoriais utilizamos o conceito de transformação linear.

Definição 4.1. *Uma transformação linear de um espaço vetorial V em outro espaço vetorial W , ambos definidos sobre o mesmo corpo F , é um mapeamento $T : V \rightarrow W$ tal que $\forall \alpha, \beta \in F$,*

$$T(\alpha|a \rangle + \beta|b \rangle) = \alpha T(|a \rangle) + \beta T(|b \rangle) \quad (4.14)$$

Obs.: Enfatizamos que o corpo associado aos dois espaços vetoriais em uma transformação linear é necessariamente o mesmo.

Notação: $T(|a \rangle) = T|a \rangle$

Uma transformação linear $T : V \rightarrow V$ é denominada um endomorfismo ou um *operador linear* em V . Duas transformações lineares $T : V \rightarrow W$ e $U : V \rightarrow W$ são iguais se somente se $T|b_i \rangle = U|b_i \rangle$ para $|b_i \rangle$ base em V . Portanto uma transformação linear é univocamente determinada através de sua ação em uma base do espaço domínio.

Vejamos em seguida alguns exemplos de transformações lineares:

Exemplo 4.1. Seja $T : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2$ a projeção do espaço tridimensional no plano XY . Definimos T através de sua ação na base canônica:

$$\begin{aligned} T(1, 0, 0) &= (1, 0), \\ T(0, 1, 0) &= (0, 1), \\ T(0, 0, 1) &= (0, 0), \end{aligned} \quad (4.15)$$

Escrevendo um elemento genérico $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ em termos da base canônica obtemos ação de T num elemento geral:

$$\begin{aligned} T(x, y, z) &= Tx(1, 0, 0) + Ty(0, 1, 0) + Tz(0, 0, 1) \\ &= x(1, 0) + y(0, 1) + z(0, 0) = (x, y) \end{aligned} \quad (4.16)$$

Veja que a ação de T na base (4.15) foi suficiente para determinar a ação geral (4.16) em qualquer elemento de $\mathbb{R}^3$.

Exemplo 4.2. Seja $P_n[t]$ o espaço vetorial complexo dos polinômios de grau menor ou igual a n de coeficientes complexos. Dado $|x\rangle \in P_n$ escrevemos

$$|x\rangle = \sum_{k=0}^n a_k t^k \quad (4.17)$$

e definimos $|y\rangle = D|x\rangle$ por

$$|y\rangle = D|x\rangle = \sum_{k=0}^n k a_k t^{k-1} \quad (4.18)$$

Nesse caso $D : P_n[t] \rightarrow P_n[t]$ é uma transformação linear endomorfismo, ou seja, um operador. Naturalmente podemos interpretar D como um operador tal que, dado um polinômio $|x\rangle$, D fornece a sua derivada $D|x\rangle$.

4.1 Kernel ou núcleo de uma transformação linear:

Uma transformação linear entre dois espaços vetoriais V e W determina um subconjunto especial do espaço domínio, denominado *kernel* da transformação.

Definição 4.2. O kernel ou núcleo de uma transformação linear, representado por $\ker T$, é o subconjunto de todos os vetores do domínio que é mapeado no zero. Ou seja, dado $T : V \rightarrow W$,

$$|v\rangle \in \ker T \Leftrightarrow T|v\rangle = 0 \quad (4.19)$$

No exemplo (4.2) anterior o kernel é constituído pelos polinômios constantes. Isto é, a derivada de um polinômio constante é nula e, se a derivada de um polinômio é zero este é constante.

Voltando ao exemplo (4.1) anterior, note que o kernel é constituído por todo o eixo Z . Todos os pontos do tipo $(0, 0, z)$ são levados em $(0, 0)$.

Observe que $\dim \mathbb{R}^3 = 1 + \dim \mathbb{R}^2$. De forma geral, temos o seguinte teorema:

Teorema 4.1. Seja $T : V \rightarrow W$ uma transformação linear. Então

$$\dim V = \dim \ker T + \dim T(V) \quad (4.20)$$

Definição 4.3. Um espaço vetorial V é dito isomorfo a outro espaço vetorial W se existir uma transformação linear bijetiva $T : V \rightarrow W$. Nesse caso T é dito um isomorfismo. Uma transformação linear bijetiva de V sobre si mesmo é dita um automorfismo. O conjunto de todos os automorfismos de V é denotado por $GL(V)$.

Definição 4.4. Uma transformação linear $T : V \rightarrow W$ em que o espaço vetorial contradomínio W coincida com o corpo associado ao espaço vetorial F , isto é, tal que $W = F$, é dita um funcional linear.

Um funcional linear é portanto simplesmente uma transformação linear que associa escalares a vetores.

Exemplo 4.3. Defina $I : C^0(a, b) \rightarrow \mathbb{R}$ como

$$I(f) = \int_a^b f(t) dt \quad (4.21)$$

Aqui $C^0(a, b)$ e $\mathbb{R}$ são considerados como espaços vetoriais sobre $\mathbb{R}$. Observe que I é uma transformação linear que associa a cada vetor $f(t) \in C^0(a, b)$ um elemento do corpo $I(f) \in \mathbb{R}$. Logo I é um funcional linear.

4.2 O Espaço Vetorial $L(V, W)$

Considere dois espaços vetoriais V e W definidos sobre o mesmo corpo F . O conjunto formado por todas as transformações lineares de V em W constitui por sua vez também um espaço vetorial sobre F , denotado por $L(V, W)$.

De fato, sejam $T : V \rightarrow W$ e $U : V \rightarrow W$ duas transformações lineares quaisquer e $\alpha \in F$. Definindo as operações

$$(T + U)|a \rangle = T|a \rangle + U|a \rangle, \quad (4.22)$$

$$(\alpha T)|a \rangle = \alpha(T|a \rangle) = \alpha T|a \rangle, \quad (4.23)$$

todas as propriedades de um espaço vetorial podem ser verificadas.

Em particular utilizamos a seguinte nomenclatura

- (a) $L(V, V) \equiv L(V) \equiv \text{end}(V)$ ($T \in L(V)$ é dito um operador)
- (b) $L(V, F) \equiv V^*$ (espaço dual de V)

Em outras palavras:

- (a) o conjunto das transformações lineares de V em V , denotado por $L(V, V)$, é um espaço vetorial especial, denominado espaço dos endomorfismos de V , representado equivalentemente por $L(V)$ ou $\text{end}(V)$. Um elemento de $\text{end}(V)$ é dito um operador sobre V .
- (b) Já o conjunto das transformações lineares de V no próprio corpo F (F também é um espaço vetorial) constitui o famoso espaço dual de V a ser abordado e definido a seguir.

4.3 Espaço Dual

Consideremos o conjunto de todos os funcionais lineares definidos num dado espaço vetorial V . Tal conjunto forma um espaço vetorial denotado por V^* e denominado espaço dual de V . De forma mais precisa definimos assim espaço dual:

Definição 4.5. *Dado um espaço vetorial V sobre um corpo F , o espaço vetorial das transformações lineares $T : V \rightarrow F$ com as operações (4.22) e (4.23) é dito espaço vetorial dual de V e denotado por V^* .*

O conceito de espaço dual será muito importante em Mecânica Quântica e deve ser muito bem compreendido. O chamado espaço dos “bras” na Mecânica Quântica nada mais é do que o espaço dual do espaço dos “kets”.

Exemplo 4.4. *Seja $V = \mathbb{R}^2$ espaço vetorial real. Considere os funcionais lineares:*

$$\begin{aligned} T1(x, y) &= x + y \\ T2(x, y) &= x - y \\ T3(x, y) &= 2x - 3y \\ T4(x, y) &= x \end{aligned} \quad (4.24)$$

Os funcionais $T1, T2, T3$ e $T4$ são elementos de V^* . Por exemplo:

$$T1 + T2 = T4, \quad T3 + 3T1 = 5T4 \quad (4.25)$$

Observe que, $\dim V = 2 = \dim V^*$

Exemplo 4.5. *Considere um espaço vetorial V complexo com vetores $|a \rangle, |b \rangle, |c \rangle, \dots$, com o produto interno definido. Selecionando um particular vetor $|a \rangle \in V$ podemos associar um número complexo a cada par de vetores através do produto interno:*

$$\langle a|a \rangle, \langle a|b \rangle, \langle a|c \rangle, \dots$$

Dessa forma definimos um funcional linear, pois uma vez selecionado $|a \rangle$ dispomos de uma regra para associar um elemento do corpo a cada vetor e, devido às propriedades de produto interno, tal regra é uma transformação linear:

$$\langle a|(\beta|b \rangle + \gamma|c \rangle) = \beta \langle a|b \rangle + \gamma \langle a|c \rangle. \quad (4.26)$$

Ou seja, (PI2) implica imediatamente (4.14).

Pois bem, essa transformação linear definida ao selecionarmos o vetor $|a\rangle \in V$ é um elemento do espaço dual. Selecionando agora outros vetores $|b\rangle, |c\rangle, \text{ etc. } \in V$ e definindo transformações lineares da mesma forma construímos um conjunto de transformações lineares, uma para cada vetor original de V . Esse conjunto de transformações lineares constitui o espaço dual V^* do espaço original V . Podemos agora representar cada elemento de V^* pela notação $\langle a| \in V^*$. Dado $|a\rangle \in V$ o processo acima descrito determina $\langle a| \in V^*$.

4.4 Uma Base para V^*

Considere um espaço vetorial complexo de base

$$B = |b_1\rangle, |b_2\rangle, \dots, |b_N\rangle \quad (4.27)$$

Para cada N -úpla de escalares $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N)$ definimos o funcional linear

$$f_\alpha |b_i\rangle = \alpha_i \quad (4.28)$$

A ação de f_α num vetor arbitrário $|a\rangle = \beta_1 |b_1\rangle + \dots + \beta_N |b_N\rangle$ é dada por

$$f_\alpha |a\rangle = \alpha_1 \beta_1 + \dots + \alpha_N \beta_N \quad (4.29)$$

De fato, qualquer funcional linear pode ser associado a um f_α e dispomos da seguinte base para V^*

$$f_1 = (1, 0, \dots, 0), \quad f_2 = (0, 1, \dots, 0), \quad \dots, \quad f_N = (0, 0, \dots, 1) \quad (4.30)$$

Em particular notamos que $\dim V = \dim V^*$

5 Álgebras

Um espaço vetorial é sem dúvida uma estrutura algébrica bastante rica, além dos vetores propriamente ditos dispomos do corpo e das várias operações entre vetores e elementos do corpo. Contudo ainda não sabemos “multiplicar” vetores. É fato que dispomos do produto interno que associa a dois vetores um elemento do corpo. Mas uma “genuína” operação binária de “multiplicação” que gera como produto um terceiro vetor não é em geral definida para espaços vetoriais. Podemos definir tal operação elevando o status de nossa estrutura algébrica de espaço vetorial para *álgebra*.

Definição 5.1. Uma álgebra A sobre um corpo F (consideraremos $\mathbb{C}$ ou $\mathbb{R}$) é um espaço vetorial V sobre F mais uma operação binária em V (“multiplicação” de vetores) que satisfaz:

$$A1) \quad a(\beta b + \gamma c) = \beta ab + \gamma ac$$

$$A2) \quad (\alpha a + \beta b)c = \alpha ac + \beta bc$$

Vejamos alguns exemplos:

Exemplo 5.1. O espaço vetorial $\mathbb{R}^2$ sobre os reais é uma álgebra? Podemos definir:

$$(x_1, x_2)(y_1, y_2) = (x_1 y_1 - x_2 y_2, x_1 y_2 + x_2 y_1) \quad (5.31)$$

e verificar que todas as propriedades requeridas para uma álgebra são satisfeitas.

Exemplo 5.2. Outro exemplo interessante de uma álgebra é o produto vetorial usual (cross) no $\mathbb{R}^3$

$$(x_1, y_1, z_1)(x_2, y_2, z_2) = (y_1 z_2 - y_2 z_1, z_1 x_2 - z_2 x_1, x_1 y_2 - x_2 y_1). \quad (5.32)$$

São válidas A1 e A2 na definição 5.1 acima e ganhamos como bônus as propriedades

$$a \times b = -b \times a, \quad (5.33)$$

$$|a \times b| = |a||b|\sin\theta. \quad (5.34)$$

Exemplo 5.3. *Produto usual de matrizes.* Já vimos que o conjunto de matrizes $m \times n$ (entradas reais ou complexas), com a soma usual de matrizes, constitui um espaço vetorial. Se agora exigirmos $m = n$ (matrizes quadradas), de forma que também possamos multiplicar as matrizes entre si, as propriedades A1 e A2 da definição 5.1 são satisfeitas e dispomos de uma álgebra.

Muitos outros exemplos relevantes em física podem ser citados, tais como: Álgebra de momento angular, álgebra dos quatérnios, álgebras de Grassmann, etc.

Observe que a definição de álgebra é bastante solta. Em geral álgebras podem ser classificadas em:

- álgebras associativas $a(bc) = (ab)c$
- álgebras comutativas $ab = ba$
- álgebras com unidade $\exists 1 \in A; a1 = 1a = a$

6 Operadores

Lembramos que o conjunto das transformações lineares $L(V, W)$ de V em W é um espaço vetorial. Em particular, dado um espaço vetorial qualquer V , consideremos o conjunto dos endomorfismos $\text{end}(V) = L(V, V) = L(V)$, que por sua vez também é um espaço vetorial sobre o mesmo corpo original. Um elemento $T \in \text{end}(V)$ é dito, por definição, um operador em V .

Definição 6.1. *Dado um espaço vetorial V , denominamos operador a uma transformação linear de V em V .*

A partir da composição de operadores:

$$T : V \rightarrow V, \quad S : V \rightarrow V, \quad T \circ S : V \rightarrow V, \quad (6.35)$$

estabelecemos uma álgebra de operadores. Os operadores, considerados como vetores, constituem por sua vez uma álgebra, na qual a operação de multiplicação satisfazendo A1 e A2 na definição 5.1 é dada pela composição de operadores.

6.1 Operadores em L_2

Consideremos uma vez mais o espaço vetorial complexo das funções complexas quadraticamente integráveis $L_2(a, b)$.

Seja $\psi : [a, b] \rightarrow \mathbb{C}$ um vetor genérico deste espaço vetorial. Sabemos que os operadores definidos em $L_2(a, b)$ constituem uma álgebra. Um operador em $L_2(a, b)$ é uma transformação linear que leva funções em funções. Alguns exemplos importantes de operadores definidos em L_2 são :

$$X \psi(x) = x\psi(x), \quad (6.36)$$

$$D \psi(x) = \frac{d\psi}{dx}(x), \quad (6.37)$$

$$\mathbb{P} \psi(x) = \psi(-x). \quad (6.38)$$

Observe que $X + D = D + X$ (espaço vetorial), mas $XD \neq DX$ (álgebra não comutativa). De fato: $D X = 1 + X D$

6.2 Notação de Dirac

Consideremos um espaço vetorial V complexo arbitrário. Introduzimos a seguinte notação (de Dirac):

$$\begin{aligned} |a\rangle, |b\rangle \in V &\longrightarrow \text{vetores (de estado) ou "kets"} \\ \langle a|, \langle b| \in V^* &\longrightarrow \text{vetores duais ou "bras" - funcionais lineares} \\ \langle a|b\rangle \in \mathbb{C} &\longrightarrow \text{produto interno entre } |a\rangle \text{ e } |b\rangle \\ &\text{ou funcional linear } \langle a| \text{ aplicado no ket } |b\rangle \\ A, B, C, X, Y, Z \in L(V) &\longrightarrow \text{operadores em } V \text{ ou } V^* \end{aligned}$$

$$|a\rangle\langle b| \in L(V) \longrightarrow \begin{array}{l} \text{produto externo entre } |a\rangle \text{ e } |b\rangle \\ \text{operador em } V \text{ ou } V^* \end{array} \quad (6.39)$$

A notação de Dirac é extremamente prática, facilitando muito a realização de contas. Na Mecânica Quântica atual podemos dizer, sem sombra de dúvida, que a notação de Dirac tornou-se um padrão universal sendo utilizada praticamente em todos os textos didáticos ou de pesquisa na área. Por convenção, na notação de Dirac, vale sempre a associatividade. Uma expressão tal com $|a\rangle\langle b|S|c\rangle$ por exemplo, pode ser interpretada da várias formas equivalentes:

$$|a\rangle\langle b|S|c\rangle = [(|a\rangle\langle b|) S] |c\rangle = (|a\rangle\langle b|) (|S|c\rangle) = |a\rangle [(\langle b|S|) |c\rangle] \quad (6.40)$$

6.3 Conjugação Hermitiana

De certa forma a operação de conjugação hermitiana em $L(V)$ é uma operação análoga à conjugação complexa no corpo dos complexos.

Definição 6.2. Dado um operador $T \in L(V)$ o seu conjugado hermitiano ou adjunto é definido por

$$\langle a|T|b\rangle^* = \langle b|T^\dagger|a\rangle \quad (6.41)$$

ou equivalentemente:

$$(T|a\rangle)^\dagger = \langle a|T^\dagger \quad (6.42)$$

No caso de representação matricial dos operadores, a operação de conjugação hermitiana é realizada simplesmente transpondo a matriz e calculando o complexo conjugado de cada uma de suas entradas. Vejamos algumas propriedades:

$$(U + T)^\dagger = U^\dagger + T^\dagger, \quad (\alpha T)^\dagger = \alpha^* T^\dagger \quad (6.43)$$

$$(UT)^\dagger = T^\dagger U^\dagger, \quad (T^\dagger)^\dagger = T \quad (6.44)$$

Dado um operador $T \in L(V)$, as seguintes definições serão muito importantes em Mecânica Quântica:

Definição 6.3. $T^\dagger = T \iff T$ é Hermitiano ou auto-adjunto.

Definição 6.4. $T^\dagger = -T \iff T$ é anti-Hermitiano

Definição 6.5. $T^\dagger T = TT^\dagger = 1 \iff T$ é unitário

De certa forma operadores hermitianos e anti-hermitianos desempenham um papel análogo a números reais puros e números imaginários puros no contexto de números complexos. Assim como um número complexo é dito um número real puro se for igual a seu complexo conjugado também um operador é dito hermitiano se for igual a seu conjugado hermitiano. Grandezas observáveis em Mecânica Quântica (tais como a componente do spin de um elétron ou a posição de uma partícula) serão representadas por operadores hermitianos. Já operadores unitários, por deixarem invariante o produto interno, serão responsáveis pela evolução temporal de um sistema bem como estarão também associados a transformações de simetria.

6.4 Comutadores

Outra álgebra muito importante definida em $L(V)$ é a álgebra dos comutadores. Como em geral a álgebra de operadores (6.35) é não comutativa, a operação de comutador indica, de certa forma, “o quanto dois operadores não comutam entre si.”

Definição 6.6. Dados dois operadores $X, Y \in L(V)$ definimos assim o seu comutador:

$$[X, Y] = XY - YX \quad (6.45)$$

Como consequência imediata seguem as propriedades:

$$[X, Y] = -[Y, X] \quad (6.46)$$

$$[\alpha X, \beta Y] = \alpha\beta [X, Y] \quad (6.47)$$

$$[X, Y + Z] = [X, Y] + [X, Z] \quad (6.48)$$

$$[X + Y, Z] = [X, Z] + [Y, Z] \quad (6.49)$$

$$[XY, Z] = X, [Y, Z] + [X, Z]Y \quad (6.50)$$

$$[X, YZ] = [X, Y]Z + Y[X, Z] \quad (6.51)$$

$$[[X, Y], Z] = -[[Z, X], Y] - [[Y, Z], X] \quad (6.52)$$

A equação (6.45) na definição 6.6, satisfazendo A1 e A2 na definição geral 5.1 de álgebra, estabelece uma álgebra de comutadores em $L(V)$. Veremos adiante em Mecânica Quântica que dois observáveis que não comutam entre si não podem ser medidos simultaneamente.

7 Autovalores e Autovetores

Dado um espaço vetorial V , selecionamos $|x\rangle \in V$ e $A \in L(V)$. Aplicando A sobre $|x\rangle$ obtemos o vetor $|y\rangle = Ax$. Em geral $A|x\rangle$ não é igual a um múltiplo de $|x\rangle$, isto é, em geral $\nexists \alpha \in F$ tal que $|y\rangle = \alpha|x\rangle$. Contudo, dado um operador A , podem existir kets especiais, aqui denotados por $|a'\rangle, |a''\rangle, |a'''\rangle, \dots$ tais que: $A|a'\rangle = a'|a'\rangle$, $A|a''\rangle = a''|a''\rangle$, $A|a'''\rangle = a'''|a'''\rangle$, $\dots$ para $a', a'', a''' \in F$. Denominamos os kets $|a'\rangle, |a''\rangle, \dots$ de *autovetores* de A , e os números complexos a', a'', a''' seus correspondentes *autovalores*.

Definição 7.1. O vetor $|\psi\rangle \in V$ é dito um autovetor do operador $A \in L(V)$ se existir $\alpha \neq 0 \in F$ tal que $A|\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle$. Nesse caso dizemos que α é o autovalor de A correspondente ao autovetor $|\psi\rangle$.

A notação $|a'\rangle, |a''\rangle$, para designar os autovetores de A com autovalores a', a'' , é útil e conveniente, mas nem sempre possível ou precisa.⁵ Um dos fatores que caracterizam a importância de operadores hermitianos é o fato de seus autovalores serem sempre reais, conforme vemos no teorema a seguir:

Teorema 7.1. (a) Os autovalores de um operador hermitiano A são reais e (b) os autovetores correspondentes a diferentes autovalores são ortogonais.

Demonstração. Escrevendo os autovalores e autovetores do operador hermitiano A como

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle \text{ e } A|a''\rangle = a''|a''\rangle \quad (7.53)$$

obtemos

$$\langle a''|A = a''^* \langle a''| \quad (7.54)$$

Logo

$$\langle a''|A|a'\rangle = a' \langle a''|a'\rangle = a''^* \langle a''|a'\rangle \quad (7.55)$$

$$(a' - a''^*) \langle a''|a'\rangle = 0 \quad (7.56)$$

Escolhendo $a' = a''$ concluímos que $a' = a'^*$ e portanto cada autovalor de A é real.

Para autovalores distintos $a' \neq a''$ segue necessariamente que $\langle a''|a'\rangle = 0$, ou seja os autovetores são ortogonais. $\square$

Definição 7.2. Um observável é um operador hermitiano cujos autovetores constituem uma base para o espaço vetorial em questão.

⁵Por exemplo se somente o valor a' não for suficiente para caracterizar univocamente o vetor $|a'\rangle \in V$, ou ainda, se estivermos trabalhando com mais de um operador $A, B, C \in L(V)$.

Dado um observável A , sempre dispomos de uma base ortonormal de autovetores:

$$\langle a'' | a' \rangle = \delta_{a' a''} \quad (7.57)$$

Podemos expandir um ket arbitrário $|\alpha\rangle$ como

$$|\alpha\rangle = \sum c_{a'} |a'\rangle \quad (7.58)$$

com os coeficientes $c_{a'} = \langle a' | \alpha \rangle$ ou seja

$$|\alpha\rangle = \sum |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle \quad (7.59)$$

7.1 Representação Matricial

Representaremos as componentes de um vetor de V numa dada base através de matrizes coluna:

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \quad |b\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}. \quad (7.60)$$

Os vetores do espaço dual por sua vez serão representados por matrizes linha:

$$\begin{aligned} \langle a| &= (a_1^* \ a_2^* \ \dots \ a_n^*), \\ \langle b| &= (b_1^* \ b_2^* \ \dots \ b_n^*). \end{aligned} \quad (7.61)$$

Nesse caso o produto interno é obtido pela regra usual de multiplicação de matrizes:

$$\langle a|b\rangle = (a_1^* \ a_2^* \ \dots \ a_n^*) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \dots + a_n^* b_n. \quad (7.62)$$

8 Descrição de Sistemas Físicos

Nesta seção nos concentraremos em como descrever um sistema físico utilizando o formalismo de espaços vetoriais desenvolvido nas seções anteriores. Em particular veremos como extrair valores numéricos do modelo para comparar com medidas experimentais.

8.1 Contextualização Histórica

A compreensão de fenômenos físicos relacionados à escala subatômica da matéria sofreu enorme reviravolta durante os primeiros 30 anos do século XX. Existem dados observacionais cuja não descrição adequada pela Física Clássica intrigou na época a comunidade de físicos. Tais dados empíricos não explicados pela Física Clássica constituíram sérios problemas, dentre os quais podemos, por exemplo, citar:

- radiação de corpo negro
- teoria de calores específicos de Einstein-Debye
- modelo atômico de Bohr
- ondas de matéria de de Broglie
- efeito fotoelétrico
- efeito Compton

A adequada descrição matemática de tais fenômenos, plenamente consistente com os dados experimentais, levou à formulação de uma “nova física” - a Mecânica Quântica.

A Mecânica Quântica foi estabelecida no século XX através de um conjunto de esforços simultâneos de vários grupos de pesquisadores internacionais. Contrariamente a teorias físicas mais antigas, não há como estabelecer somente um “pai da Física Quântica”. Para citar nomes, dentre uma enorme gama de colaboradores na construção da Mecânica Quântica como conhecemos hoje, podemos destacar os pioneiros Werner Heisenberg, Erwin Schrödinger, e Paul Dirac.

8.2 Experimento de Stern-Gerlach

Durante os anos de 1921 e 1922, Otto Stern e Walther Gerlach realizaram um experimento físico em Frankfurt com átomos de prata que veio a se tornar um dos ícones da Mecânica Quântica. Os resultados de tal experimento não podem ser explicados pela Física Clássica. De fato, o experimento de Stern-Gerlach pode ser descrito por um sistema quântico simples bidimensional, o qual utilizaremos para ilustrar as principais características da Mecânica Quântica. Escolhemos este sistema para começar, por um lado, por sua simplicidade matemática (espaço vetorial complexo bidimensional) e, por outro, por exibir radicais diferenças em relação a sistemas clássicos, enfatizando portanto seus aspectos quânticos.

Considere um conjunto de átomos de prata que são aquecidos em um forno. Através de um orifício no forno, geramos um feixe colimado de átomos de prata que passa por um campo magnético não-homogêneo (figura 1). Após a passagem através do campo magnético os átomos interagem com um detector que determina suas posições espaciais. Observa-se que o feixe inicial é subdividido em dois feixes distintos. Como explicamos esse

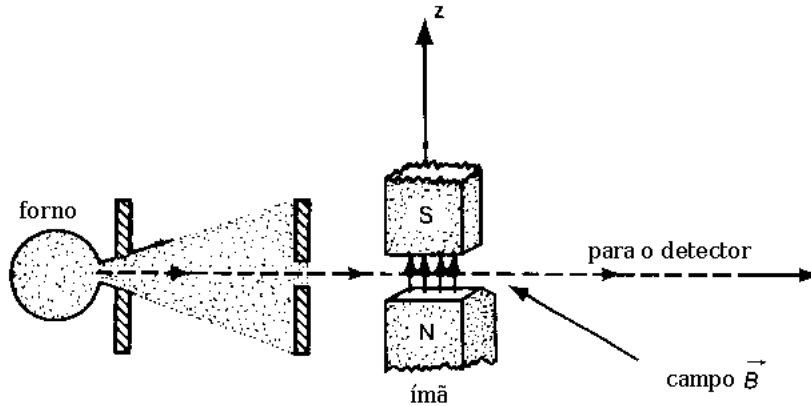


Figura 1: O experimento de Stern-Gerlach (1921-1922)

resultado?

8.3 Espaço de Estados

Consideremos um espaço vetorial complexo de dimensionalidade especificada de acordo com a natureza física do sistema em questão.

Um estado físico do sistema é representado por uma vetor deste espaço, denominado vetor de estado (ou ket):

$$|\alpha\rangle = |\text{estado do sistema}\rangle. \quad (8.63)$$

Postulamos que o vetor de estado contém toda informação do estado físico. Ou seja, qualquer informação a que possamos ter acesso sobre o sistema deve estar contida no vetor de estado. Se o estado do sistema evoluir com o tempo, então $|\alpha\rangle$ deve ser função do tempo. Por enquanto vamos nos preocupar apenas com a descrição do sistema físico num instante de tempo fixo, o problema de sua evolução temporal será abordado a partir da seção 9.

No exemplo do experimento de Stern-Gerlach, o estado S_z+ será representado por:

$$|S_z; + \rangle . \quad (8.64)$$

A notação $|S_z; + \rangle$ caracteriza o vetor que representa um átomo que após passar pelo campo magnético na direção Z rumou no sentido positivo. Se o átomo tivesse rumado no sentido negativo da direção Z , seu estado seria $|S_z; - \rangle$.

Como existem duas possibilidades distintas medidas na saída do experimento de Stern-Gerlach, estamos diante de um espaço vetorial complexo de dimensão dois: O estado $|S_x; + \rangle$ é uma combinação linear de estados relativos a S_z :

$$|S_x; + \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z; + \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z; - \rangle , \quad (8.65)$$

assim como

$$|S_x; - \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z; + \rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z; - \rangle \quad (8.66)$$

Naturalmente se estamos representando estados do sistema como elementos de um espaço vetorial, temos o direito de somarmos dois estados e obter um terceiro.

De fato consideraremos que dois kets múltiplos um do outro representam o mesmo estado. Ou seja um estado físico é uma classe de equivalência no espaço dos kets. Por exemplo os seguintes dois kets:

$$2|S_x; + \rangle + 3i|S_y; - \rangle , \quad 4|S_x; + \rangle + 6i|S_y; - \rangle \quad (8.67)$$

representam o mesmo estado físico.

8.4 Observáveis

Um observável A pode ser representado por um operador hermitiano atuando sobre o espaço dos kets:

$$|\beta \rangle = A|\alpha \rangle . \quad (8.68)$$

Naturalmente podemos ter autovalores e autovetores. Um auto-vetor do operador hermitiano A é um ket denotado por $|a \rangle$ tal que

$$A|a \rangle = a|a \rangle , \quad (8.69)$$

onde $a \in \mathbb{R}$ é o autovalor correspondente. Lembramos que, de acordo com o teorema 7.1, os autovalores de um operador hermitiano são reais. O resultado a ser efetivamente medido em um dado experimento físico será sempre um autovalor de um operador hermitiano.

Reportando ao exemplo do experimento de Stern-Gerlach, associamos operadores aos aparatos de medida. Considerando três direções espaciais mutuamente ortogonais X, Y e Z , construímos os operadores:

$$S_x , \quad S_y , \quad S_z . \quad (8.70)$$

Resultados físicos das medidas (números reais) serão associados aos autovalores dos operadores. Por exemplo ao observarmos a divisão do feixe no experimento de Stern-Gerlach (figura 1) nos dois sentidos possíveis da direção Z estamos medindo a componente Z do momento angular (spin do último elétron) do átomo de prata, cujo valor pode ser $\frac{\hbar}{2}$ ou $-\frac{\hbar}{2}$. Por definição temos então:

$$S_z|S_z; + \rangle = \frac{\hbar}{2}|S_z; + \rangle , \quad (8.71)$$

$$S_z|S_z; - \rangle = -\frac{\hbar}{2}|S_z; - \rangle . \quad (8.72)$$

O mesmo ocorre se girarmos o aparato da direção espacial Z para X :

$$S_x|S_x; + \rangle = \frac{\hbar}{2}|S_x; + \rangle , \quad (8.73)$$

$$S_x|S_x; - \rangle = -\frac{\hbar}{2}|S_x; - \rangle . \quad (8.74)$$

De fato no presente caso bidimensional, os dois autovetores de qualquer um dos três operadores S_x, S_y, S_z constituem uma base.

Para fixarmos uma referência, tomamos os autovetores de S_z como base e introduzimos a notação:

$$|+> \equiv |S_z; +>, \quad |-> \equiv |S_z; ->. \quad (8.75)$$

Portanto os vetores $|+>$ e $|->$ representam, por definição, os autovetores do operador S_z , e constituem uma base para o espaço de estados. Naturalmente podemos escrever qualquer estado físico do sistema como uma combinação linear de $|+>$ e $|->$. Alguns estados típicos para o átomo de prata são:

- a) $|S_z; +> = |+>$,
- b) $|S_z; -> = |->$,
- c) $|S_x; +> = \frac{1}{\sqrt{2}}|+> + \frac{1}{\sqrt{2}}|->$,
- d) $|S_x; -> = -\frac{1}{\sqrt{2}}|+> + \frac{1}{\sqrt{2}}|->$,
- e) $|\psi> = a|+> + b|->$, com $a^*a + b^*b = 1$.

8.5 Medida em Mecânica Quântica

Uma das principais diferenças entre a Mecânica Quântica e a Mecânica Clássica encontra-se na forma como o problema da medida é tratado. Nas palavras de um dos pais da Mecânica Quântica: “Uma medida sempre faz o sistema “saltar” para um auto-estado da variável dinâmica que está sendo medida.” (P. A. M. Dirac)

$$|\alpha> = \sum_{a'} c_{a'} |a'> = \sum_{a'} |a'> \langle a'|\alpha>. \quad (8.76)$$

A partir do estado $|\alpha>$ acima, ao efetuamos uma medida referente ao observável A , o sistema “colapsa” para um dos auto estados de A :

$$|\alpha> \xrightarrow{\text{medida de } A} |a'>. \quad (8.77)$$

Estando já o sistema em um dos autoestados de A , uma medida deste observável não altera o estado dos sistema:

$$|a'> \xrightarrow{\text{medida de } A} |a'>. \quad (8.78)$$

8.6 Partícula em Uma Dimensão

Analisemos agora um segundo exemplo simples e interessante: uma partícula em movimento unidimensional. Desejamos portanto descrever o estado de uma partícula que pode ser localizada ao longo de uma linha reta.

Um possível experimento é “localizar” a partícula, isto é, medir a posição onde ela se encontra. Como o resultado dessa medida pode ser em princípio qualquer número real, precisamos de um espaço vetorial complexo de dimensão infinita!

Associamos à partícula um vetor de estado:

$$|\psi> = \psi(x) \quad (8.79)$$

Definimos X como um operador hermitiano cujos autovalores representam a posição da partícula. Associada a X dispomos de uma base $|x>$ tal que:

$$X|x> = x|x> \quad (8.80)$$

8.7 Relação de Incerteza

Dado um observável A , definimos o operador

$$\Delta A \equiv A - \langle A \rangle \quad (8.81)$$

o valor de espera de $(\Delta A)^2$ é a dispersão de A . Observe que

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (8.82)$$

A dispersão de um observável A , relativa a um estado, caracteriza a “incerteza” no conhecimento de A .

Por exemplo para o estado $S_z +$ de um sistema de spin $1/2$ temos

$$\langle S_x^2 \rangle - \langle S_x \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4} \quad (8.83)$$

De forma geral pode-se demonstrar a seguinte relação de incerteza:

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq |\langle [A, B] \rangle|^2 \quad (8.84)$$

Em particular vemos que se dois observáveis A e B não comutarem entre si, ou seja se $[A, B] \neq 0$, existe um limite teórico para as correspondentes incertezas. Ou seja, não podemos determinar A e B com precisão arbitrária simultaneamente.

9 Dinâmica Quântica

Até o momento estávamos preocupados apenas com a descrição estatística de um sistema físico e como a partir desta podíamos efetuar previsões (probabilísticas) de resultados experimentais num dado instante fixo de tempo. Nesta seção veremos como os estados físicos evoluem dinamicamente com o tempo.

Dado um sistema físico (espaço vetorial complexo), considere dois estados do sistema (vetores) num dado instante de tempo $t = 0$:

$$|\psi\rangle \quad \text{e} \quad |\phi\rangle \in V$$

Após um certo intervalo de tempo t é possível que tais estados tenham se modificado, digamos que tenham evoluído para:

$$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi(t)\rangle, \quad |\phi\rangle \longrightarrow |\phi(t)\rangle.$$

Tal evolução deve ocorrer mantendo invariante os produtos internos:

$$\langle a|b \rangle = \langle a(t)|b(t) \rangle. \quad (9.85)$$

Considerando que a evolução temporal é realizada por um operador $U(t)$

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi\rangle \quad (9.86)$$

concluimos que

$$\langle \psi|\phi \rangle = \langle A(t)|B(t) \rangle = \langle A|U^\dagger(t)U(t)B \rangle \Rightarrow U^\dagger(t)U(t) = 1. \quad (9.87)$$

Ou seja, $U(t)$ deve ser um operador unitário.

Postulamos que a evolução temporal dos vetores de estado é determinada pelo operador Hamiltoniana H através de:

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t) = H U(t) \quad (9.88)$$

que por sua vez conduz a

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (9.89)$$

conhecida como a famosa equação de Schrödinger!

9.1 Os Postulados da Mecânica Quântica

Após a discussão do formalismo matemático e da análise dos exemplos anteriores, estamos finalmente em condições de apresentarmos os postulados da Mecânica Quântica:

- 1) Em um dado instante de tempo fixo t_0 o estado de um sistema físico é definido por um ket $|\psi(t_0)\rangle$ pertencente a um espaço vetorial V associado ao sistema.
- 2) Quantidades mensuráveis são descritas por operadores hermitianos atuando em V .

3) Os resultados possíveis para a medida de uma quantidade física correspondem aos autovalores do respectivo observável.

4) A probabilidade de obtermos um dado autovalor a_n associado a um observável em um estado normalizado $|\psi\rangle$ é dada por

$$P(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2. \quad (9.90)$$

5) Imediatamente após a medida de um autovalor associado a um observável o sistema colapsa para o autoestado correspondente.

6) A evolução temporal de um estado físico é governada pela equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (9.91)$$

10 Aplicações da Mecânica Quântica

O acordo experimental com as previsões da Mecânica Quântica em inúmeras situações físicas é inegável. Em particular a descrição de sistemas subatômicos, da tabela periódica, reações químicas e nucleares, além de todos os problemas mencionados no início da seção 8, constituem exemplos do escopo de aplicações bem sucedidas da Mecânica Quântica. Nesta seção estudaremos exemplos simples de evolução temporal de sistemas quânticos.

10.1 Campo Magnético Uniforme - Evolução do Spin

Consideremos um sistema de spin 1/2 com momento magnético $e\hbar/2mc$ submetido à ação de um campo magnético uniforme estático B .

$$H = \frac{e}{mc} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = \frac{eB}{mc} S_z \equiv \omega S_z \quad (10.92)$$

Nesse caso como H independe do tempo, a solução para

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t) = H U(t) \quad (10.93)$$

é simplesmente

$$U(t) = \exp\left(\frac{-i\omega S_z t}{\hbar}\right). \quad (10.94)$$

A partir do estado inicial $|\psi\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle$ determinamos

$$|\psi(t)\rangle = a \exp\left(\frac{-i\omega t}{\hbar}\right) |+\rangle + b \exp\left(\frac{+i\omega t}{\hbar}\right) |-\rangle \quad (10.95)$$

Se o sistema estiver inicialmente com spin na direção Z positivo

$$a = 1, b = 0, \quad |\psi\rangle = |+\rangle \quad (10.96)$$

ele assim permanecerá:

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(\frac{-i\omega t}{\hbar}\right) |+\rangle. \quad (10.97)$$

Esse é portanto um exemplo de um estado estacionário, pois $|\psi(t)\rangle$ somente modifica sua fase com o passar do tempo.

Contudo suponha que ele esteja inicialmente no estado S_x+ , caracterizado por

$$a = b = \frac{\sqrt{2}}{2}. \quad (10.98)$$

Um cálculo simples de probabilidade nos conduz a

$$|\langle S_x; + | \psi(t) \rangle|^2 = \cos^2 \frac{\omega t}{2}, \quad (10.99)$$

e

$$|\langle S_x; - | \psi(t) \rangle|^2 = \sin^2 \frac{\omega t}{2}. \quad (10.100)$$

A probabilidade de encontrarmos o sistema com spin nas direções positiva e negativa orbita com frequência ω . Para os valores médio das três componentes do spin, calculamos:

$$\langle S_x \rangle = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \frac{\cos^2 \omega t}{2} + \left(-\frac{\hbar}{2}\right) \frac{\sin^2 \omega t}{2} = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \cos \omega t \quad (10.101)$$

$$\langle S_y \rangle = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \sin \omega t \quad (10.102)$$

$$\langle S_z \rangle = 0. \quad (10.103)$$

Ou seja, o spin precessiona em torno do eixo Z .

10.2 Partícula Livre Unidimensional

Consideremos novamente uma partícula em movimento ao longo de uma linha reta, conforme vimos na seção 8.5. Os estados possíveis para a partícula são dados pelas funções complexas

$$|\psi\rangle = \psi(x) \quad (10.104)$$

Para determinarmos a evolução temporal precisamos do operador hamiltoniano. A Física nos informa que para uma partícula livre, o operador Hamiltoniano é dado por

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (10.105)$$

Os auto estados desse hamiltoniano podem ser escritos como

$$\psi_p(x) = A e^{-i \frac{px}{\hbar}} \quad (10.106)$$

onde p representa um número real parametrizando uma família infinita de autofunções.

A solução de onda plana (10.106) para partícula livre descreve uma partícula com momento linear p bem definido, com densidade de probabilidade igualmente distribuída por todo o espaço. De certa forma esse resultado é o análogo à primeira lei de Newton (lei da inércia) da Física Clássica para a Mecânica Quântica.

11 Conclusões

Dentre as várias aplicações da Álgebra Linear estudamos em detalhe seu papel na Mecânica Quântica. Revisamos definições e propriedades de várias estruturas algébricas, desde o conceito de grupo até o de álgebras sobre espaços vetoriais complexos. Enfatizamos o papel desempenhado pela Álgebra Linear na Mecânica Quântica descrevendo os estados possíveis de um sistema físico através de um espaço vetorial complexo e associando operadores hermitianos a grandezas observáveis. Aplicamos o formalismo aos exemplos de campo magnético uniforme e partícula livre.

Para encerrarmos essa breve digressão sobre Álgebra Linear aplicada à Mecânica Quântica, é importante ressaltarmos os seguintes aspectos:

(i) Historicamente, a Matemática e a Física sempre se desenvolveram juntas - uma auxiliando a outra - conforme pode ser constatado observando qualquer compêndio de história de uma dessas duas ciências. Atualmente um alto grau de especialização nas áreas de pesquisa de ponta separa fortemente essas duas grandes áreas do conhecimento, tornando muitas vezes o diálogo entre seus representantes impossível. Acreditamos que esta parceria entre Matemática e Física deve ser resgatada, para o benefício de ambas. Neste trabalho conectando Álgebra Linear e Mecânica Quântica fica patente que ambas as áreas podem contribuir significativamente para o desenvolvimento da outra.

(ii) Existem conceitualmente muitos problemas matemáticos interessantes em aberto na Mecânica Quântica. Nem a Física nem a Matemática são Ciências prontas e acabadas, mas encontram-se em ativo desenvolvimento. Procuramos mostrar nesse trabalho que muito ainda falta a ser feito. Existe um vasto campo de trabalho aguardando nossos atuais jovens estudantes. Em particular em Análise Funcional temos muitos resultados ainda a serem explorados em espaços vetoriais de dimensão infinita.

(iii) Ao ensinarmos Matemática de maneira geral, mesmo nas primeiras séries fundamentais, não podemos perder de vista suas inúmeras aplicações . A maior parte da Matemática Moderna, dita abstrata, possui bastante aplicação em Física. Acreditamos ser importante mostrar, particularmente a alunos de matemática pura, onde a abstração de definições, teoremas, lemas, provas, etc. pode levar. Vimos neste trabalho de forma concreta como a álgebra abstrata pode conduzir a resultados numéricos sobre um sistema físico a serem confrontados com medidas experimentais.

(iv) A generalização da Mecânica Quântica para a Teoria Quântica de Campos apresenta enormes dificuldades conceituais matemáticas. A Mecânica Quântica ainda não é o “fim da história”, para compatibilizá-la com a Relatividade Restrita é necessário uma radical generalização - a chamada “segunda quantização”. Apesar do inegável avanço na explicação e previsão de resultados experimentais muito ainda falta para “arrumar a casa” (axiomatização). Ou seja: mais um fértil campo de trabalho para o matemático puro.

Referências

- [1] HASSANI, S. - *Mathematical Physics - A Modern Introduction to Its Foundations*, Springer, 2000.
- [2] BIRKHOFF, G.; MAC LANE, S. - *A Survey on Modern Algebra*, 1967.
- [3] COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. - *Quantum Mechanics*, Wiley-Interscience, New York, 1977.
- [4] SAKURAI, J. H. - *Modern Quantum Mechanics*, revised edition, Addison-Wesley, Late, University of California, Los Angeles, 1994.
- [5] HALMOS, P. - *Finite-Dimensional Vector Spaces*, Van Nostrand, 1958.
- [6] AXLER, S. - *Linear Algebra Done Right*, Springer-Verlag, 1996.
- [7] GONÇALVES, A. - *Introdução à Álgebra*, IMPA, 1999.
- [8] TOLEDO PIZA, A. F. R. - *Mecânica Quântica*, edusp, 2003.