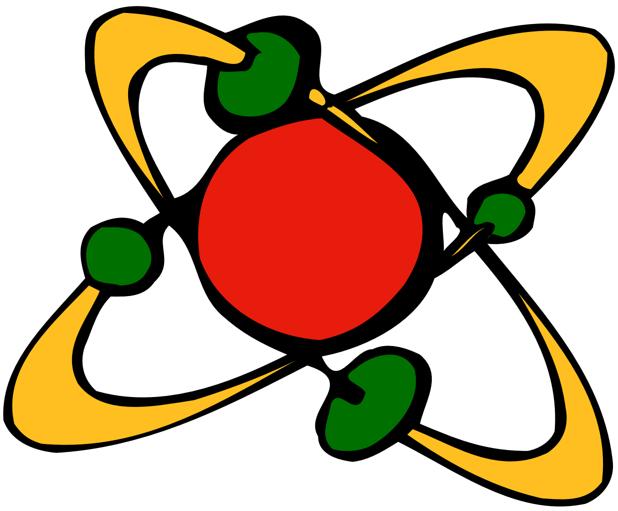
MECÂNICA QUÂNTICA
FORMALISMO
(Parte 1)

Parte de notas de aulas relacionadas à disciplina FIS 660-Mecânica Quântica, do curso de Mestrado em Física da Universidade Federal de Viçosa durante os anos de 2001 a 2005. O conteúdo é equivalente a aproximadamente 6 aulas. O texto é baseado no livro "Modern Quantum Mechanics" de J.J. Sakurai, adotado nessa disciplina durante o período acima mencionado.

Prof. Afrânio Rodrigues Pereira
Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa,
Viçosa, 36570-000, Minas Gerais.
Email: apereira@ufv.br



MECÂNICA QUÂNTICA
(Aulas 3 e 4: Introdução ao Formalismo Matemático da Teoria)

Na aula passada vimos, com o exemplo do experimento de Stern-Gerlach em seqüência, que é impossível determinarmos (medirmos) simultaneamente as componentes S_x , S_y ou S_z do spin do elétron. Mais precisamente, podemos dizer que a seleção do feixe S_x (ver figura abaixo) pelo segundo aparato **SGx** destruirá completamente qualquer informação prévia a respeito de S_z . Deve ficar claro na cabeça do estudante que a limitação encontrada na determinação de duas componentes do spin (S_x e S_z por exemplo) não é devida à incompetência do Físico experimental . Tal limitação é inerente ao próprio experimento e ao fenômeno microscópico.

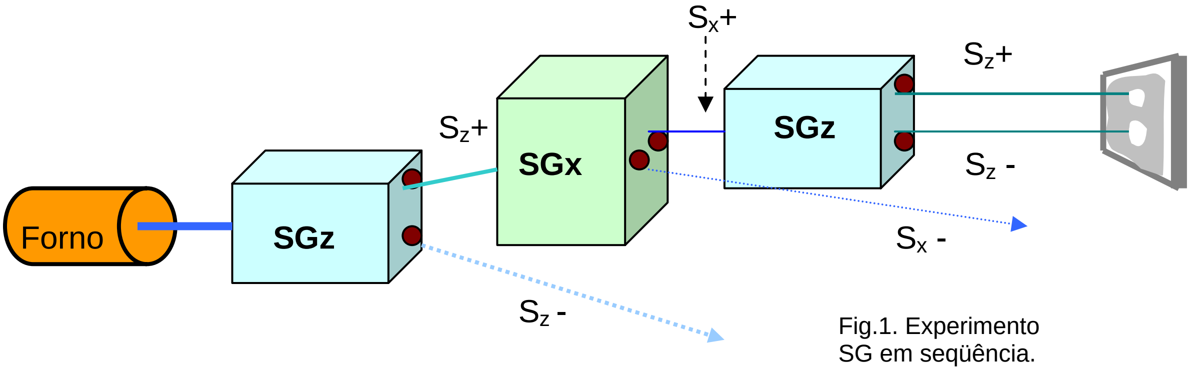


Fig.1. Experimento SG em seqüência.

Para tratar esse fenômeno (sem análogo na Física clássica) de uma maneira quantitativa, o livro do Sakurai introduz uma matemática bastante conhecida de soma vetorial aplicada à polarização da luz. Essa analogia entre o problema dos spins apresentado acima e a polarização da luz é apenas matemática e servirá para indicar o caminho a seguir para tratarmos de fenômenos quânticos.

A teoria eletromagnética de Maxwell considera a luz , bem como todas as demais radiações eletromagnéticas, uma onda transversal (isso significa que os campos elétricos e magnéticos estão vibrando em uma direção perpendicular à direção de propagação da luz ; ver figura 2).

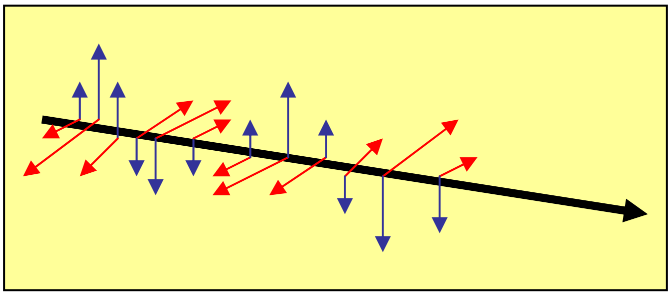


Fig. 2. "Fotografia" instantânea de uma onda plano-polarizada mostrando os vetores campos elétrico (setas azuis) e magnético (setas vermelhas) ao longo de um raio.

Um feixe de luz polarizado pode ser obtido deixando-se passar luz não polarizada (ver figura 3) por um filtro polaróide (placa polarizadora). Filtro que seleciona um feixe polarizado na direção x, é chamado filtro–**x**. Obviamente, se rodarmos o filtro-**x** por 90^0 sobre a direção de propagação **z**, ele se torna um filtro-**y** (para uma revisão desse assunto, consulte os seus livros de Física básica). Consideremos uma onda de luz se propagando na direção **z**. Um feixe de luz linearmente polarizado com vetor polarização na direção **x** (onda **x**-polarizada), tem vetor campo elétrico oscilando na direção **x** dado por

$$\vec{E} = E_0 \hat{x} \cos(kz - \omega t)\,, \tag{1}$$

e da mesma forma, uma onda de luz **y**-polarizada , também se propagando n direção **z** tem

$$\vec{E} = E_0 \hat{y} \cos(kz - \omega t)\,. \tag{2}$$

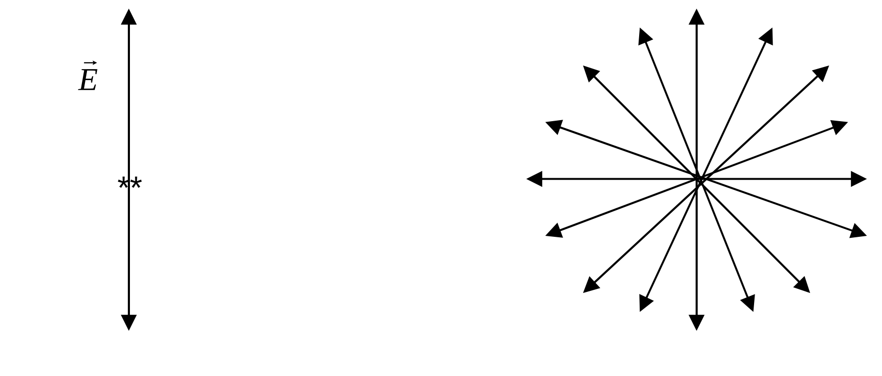


Fig.3. Luz polarizada (esquerda) e luz não polarizada (direita)

Um fato bastante conhecido é o seguinte : quando deixamos um feixe de luz não polarizada passar através de um filtro-**x** e subseqüentemente ele atinge um filtro-**y**, nenhuma luz resultará atrás das placas, é claro, se as placas polarizadoras tiverem 100% de eficiência (ver fig. 4).

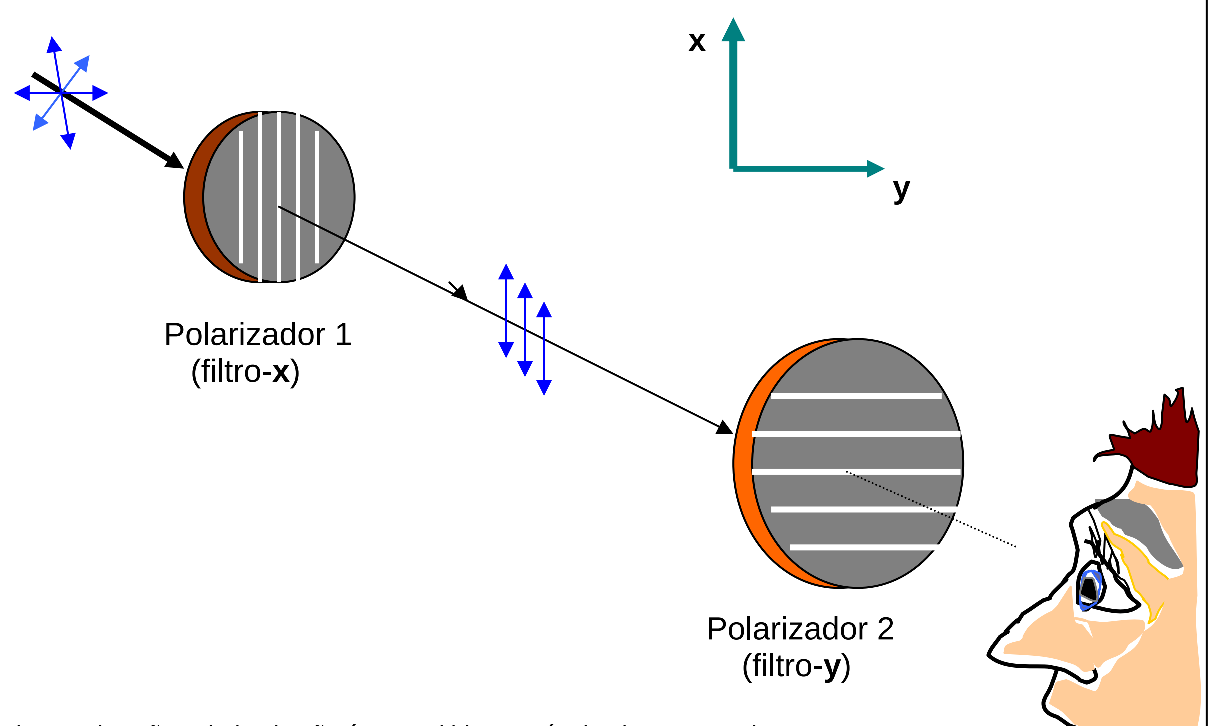


Fig. 4. A luz não polarizada não é transmitida através de placas cruzadas

A situação é mais interessante quando inserimos um terceiro filtro entre os filtros **x** e **y** . Se chamarmos esse polarizador de filtro-**x’** e considerarmos que ele faz um angulo de 45^0 com a direção **x** no plano **xy**, temos a seguinte representação (Fig. 5):

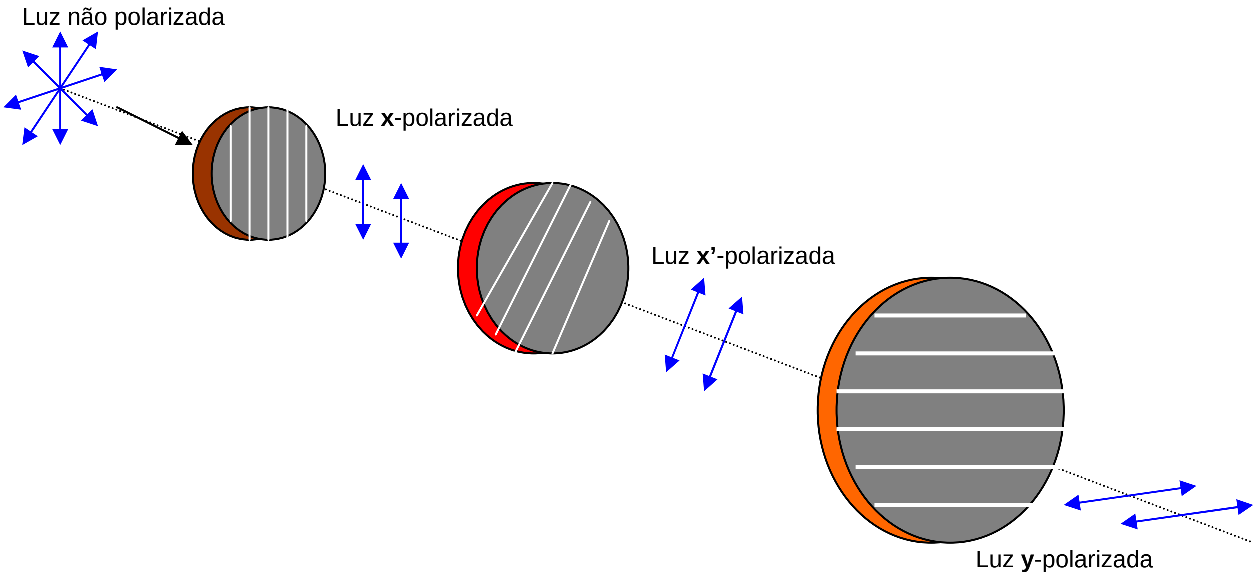


Fig. 5. Um terceiro filtro-**x'** destruirá qualquer informação prévia sobre a polarização da luz.

Podemos então concluir que a seleção do feixe **x'**-polarizado feita pelo segundo polarizador (filtro-**x'**) destruirá qualquer informação prévia sobre a polarização da luz. Note que essa situação é bastante parecida com a situação encontrada anteriormente com o experimento de Stern-Gerlach, se fizermos a seguinte correspondência :

Átomos S_z $\pm$ $\longleftrightarrow$ **Luz polarizada x , y**

Átomos S_x $\pm$ $\longleftrightarrow$ **Luz polarizada x' , y'**

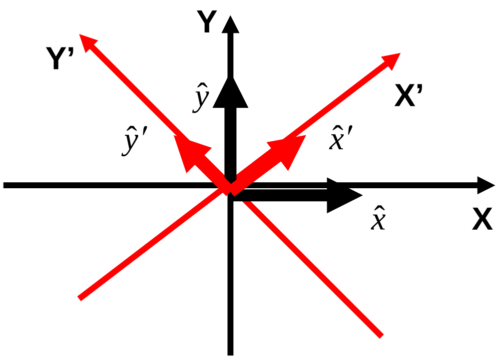


Fig.6. Sistema de coordenadas

Usando a figura acima, é fácil ver que

$$E_0\hat{x}'\cos(kz-\omega t) = E_0\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{x}\cos(kz-\omega t) + \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{y}\cos(kz-\omega t)\right], \qquad (3)$$

$$E_0\hat{y}'\cos(kz-\omega t) = E_0\left[-\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{x}\cos(kz-\omega t) + \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{y}\cos(kz-\omega t)\right]. \qquad (4)$$

Assim, no arranjo de três polarizadores mostrado na figura 5, o feixe saindo do primeiro polarizador é um feixe **x**-polarizado, que pode ser considerado como uma combinação linear de um feixe **x'**-polarizado e um feixe **y'**-polarizado . O segundo polarizador seleciona um feixe **x'**-polarizado , que novamente pode ser considerado como uma combinação linear de um feixe **x**-polarizado e um **y**-polarizado. Finalmente o terceiro polarizador seleciona uma componente **y**-polarizada.

A aplicação da correspondência para a experiência de Stern-Gerlach em seqüência sugere que podemos ser capazes de representar o "estado-spin" dos átomos de prata por algum tipo de vetor em um novo tipo de espaço vetorial bidimensional, um espaço vetorial abstrato. Assim, da mesma forma que $\hat{x}$ e $\hat{y}$ são vetores bases unitários usados para decompor o vetor polarização $\hat{x}'$ da luz **x'**-polarizada, é razoável representar o estado S_x + por um vetor, que chamaremos ket. Tais vetores ket's serão nossos instrumentos de trabalho dentro da notação de Dirac que será desenvolvida mais tarde. Nós denotaremos esse vetor ket pelo símbolo $|S_x ; +>$ e o representaremos como uma combinação linear de **dois vetores base** $|S_z ; +>$ **e** $|S_z ; ->$ fazendo a seguinte conjectura

$$? \quad |S_x ; +> = \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z ; +> + \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z ; ->, \qquad (5)$$

$$? \quad |S_x ; -> = -\frac{1}{\sqrt{2}}|S_z ; +> + \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z ; ->, \qquad (6)$$

em analogia com as equações (3) e (4) para o campo elétrico. Assim, a componente não bloqueada que sai do segundo aparato (que sai de SG**x**) será considerada como uma superposição de S_z + e S_z – no sentido expresso pelas equações (5) e (6). Matematicamente, é por essa razão que as duas componentes emergem do terceiro aparato (SG**z**).

ESPAÇO BIDIMENSIONAL (X,Y)	ESPAÇO VETORIAL ABSTRATO 2D
1) Vetores da base: $\hat{x}, \hat{y}$ 2) Qualquer vetor pode ser escrito como combinação linear dos vetores da base.	1) vetores da base : $|S_z ; +>, |S_z ; ->$ 2) Qualquer vetor nesse espaço pode ser escrito como uma combinação linear desses vetores da base.

Agora devemos saber como escrever $|S_y ; +>$ e $|S_y ; ->$. Note que as possibilidades de combinação linear com uma base 2D já foram esgotadas nas equações (5) e (6). Será mesmo?! Na realidade, foram esgotadas apenas as possibilidades com coeficientes reais ! Aqui, Sakurai fará outra analogia com a polarização da luz. Vejamos!

Polarização Circular

Matematicamente, como podemos representar uma luz circularmente polarizada? Veja a figura 7! Imagine duas ondas plano-polarizadas, uma **x**-polarizada e outra **y**-polarizada, defasadas por 90^0. O campo elétrico resultante pode ser escrito como :

$$\vec{E} = E_0\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\,\hat{x}\cos(kz-\omega t)+\frac{1}{\sqrt{2}}\,\hat{y}\cos(kz-\omega t\pm\frac{\pi}{2})\right]. \qquad (7)$$

Essa equação é mais elegantemente escrita empregando a notação complexa:

$$\vec{E} = \mathrm{Re}\,E_0\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\,\hat{x}e^{i(kz-\omega t)} \pm \frac{i}{\sqrt{2}}\,\hat{y}e^{i(kz-\omega t)}\right], \qquad (8)$$

onde usamos $i = e^{i\pi/2}$.

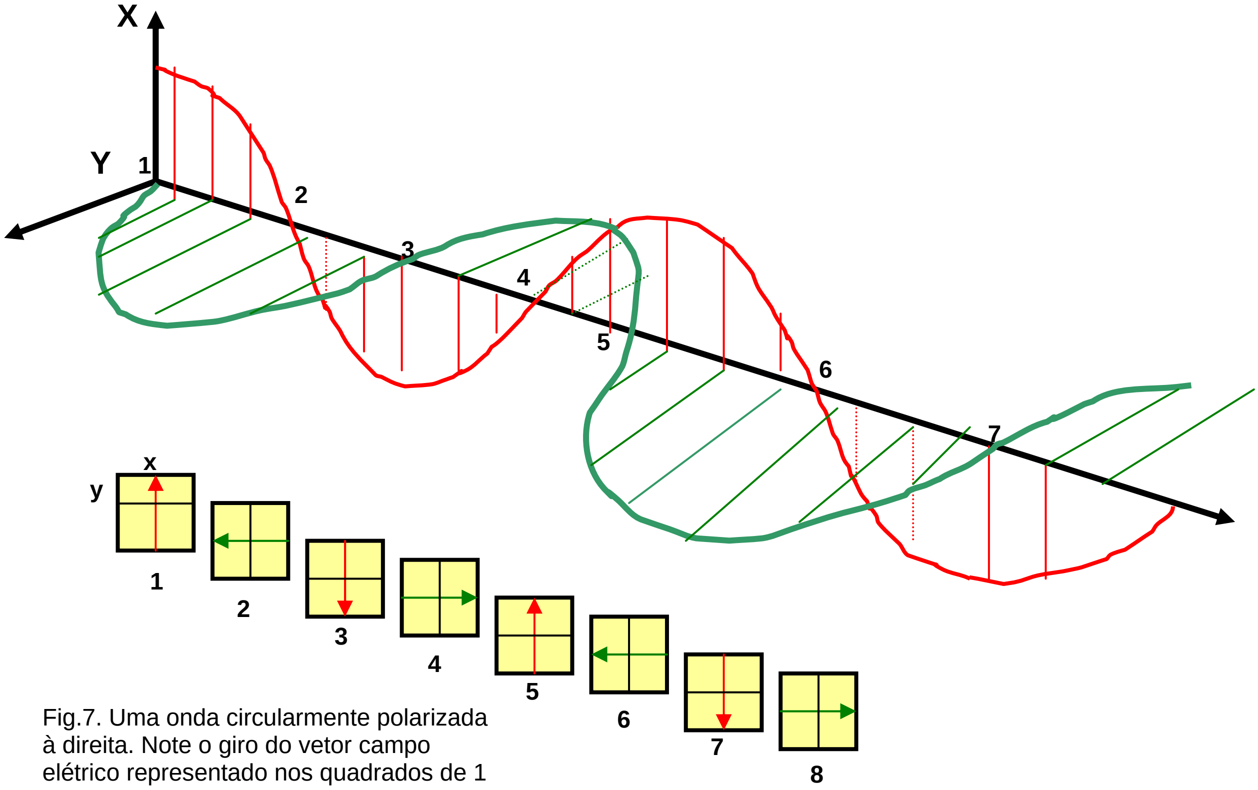
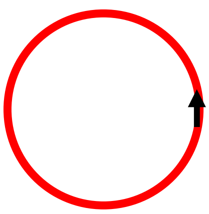
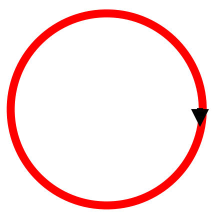


Fig.7. Uma onda circularmente polarizada à direita. Note o giro do vetor campo elétrico representado nos quadrados de 1 a 8 e compare com a figura. Considere que o feixe caminhe em sua direção.

Podemos definir :

 **Luz circularmente polarizada à direita** quando o fim do vetor campo elétrico (se a luz vem em nossa direção) circula no sentido anti-horário.	 **Luz circularmente polarizada à esquerda** quando o fim do vetor campo elétrico (se a luz vem em nossa direção) circula no sentido horário.

(observação: não existe unanimidade na definição de luz circularmente polarizada à esquerda e à direita. A convenção adotada aqui segue o padrão usado em física de partículas).

Da equação (8) podemos fazer a seguinte analogia com os átomos de prata :

Átomos S_y + $\longleftrightarrow$ **Feixe circularmente polarizado à direita**

Átomos S_y - $\longleftrightarrow$ **Feixe circularmente polarizado à esquerda,**

Pois dessa forma temos mais uma maneira de escrever um vetor em termos de $\hat{x}, \hat{y}$, só que dessa vez os coeficientes são complexos. Assim, os vetores $|\mathbf{S_y}\,;\, \pm >$ podem ser facilmente escritos usando a equação (8)

$$|\mathbf{S_y}\,;\, \pm > = \frac{1}{\sqrt{2}}|\mathbf{S_z}\,;\, + > \pm \frac{i}{\sqrt{2}}|\mathbf{S_z}\,;\, - > \qquad \mathbf{(9)}$$

Logo, a analogia com um problema físico concreto, nos deu um importante discernimento sobre como tratar matematicamente os incríveis resultados da experiência de Stern-Gerlach, e ainda mostrou que para descrevermos os estados de spin dos átomos de prata, devemos trabalhar em um espaço vetorial complexo.

ESPAÇO VETORIAL BIDIMENSIONAL ABSTRATO
(ESPAÇO SPIN)

1- **Vetores da base : $|\mathbf{S_z}\,;\, + >$, $|\mathbf{S_z}\,;\, - >$**
2- **Qualquer vetor arbitrário nesse espaço vetorial é escrito como uma combinação linear desses vetores da base com coeficientes complexos em geral.**

O fato de ser necessário o uso de números complexos nesse exemplo elementar é bastante notável e já demonstra que a nossa matemática daqui para frente estará contida no conjunto dos números complexos. Vocês devem estar lembrados do curso de estrutura da matéria, que a equação de Schrödinger é uma equação diferencial com a presença números complexos e que apenas o quadrado da função de onda (solução da equação) tem um significado físico, já que o quadrado de um número complexo é um número real.

FÍSICA QUÂNTICA I
(Aulas 5 e 6: Conceitos Fundamentais)

4. INTODUÇÃO

Já vimos através de um exemplo simples relacionado ao sistema de spins que temos que mudar radicalmente nossa maneira de pensar se quisermos nos aventurar no mundo microscópico. A Física clássica não consegue dar conta desses novos fenômenos e necessariamente precisamos de uma nova teoria. Começaremos nessa aula o estudo detalhado da teoria quântica não relativística. Como o próprio nome indica, essa teoria não pode tratar de fenômenos microscópico relativísticos e portanto seu alcance de aplicação é limitado. Uma união entre teoria quântica e relatividade leva a uma teoria muito mais satisfatória da natureza com um poder de previsão fantástico de forma que podemos dizer que o todo (teoria quântica relativística) é maior que a soma das partes (Física quântica e relatividade). Mas existem muitos fenômenos em que as partículas quânticas se movem a baixas velocidades e assim a teoria desenvolvida aqui se aplica e com grande precisão.

Quando se fala em uma teoria, pensamos de inicio sobre os seus postulados (um postulado é uma sentença aceita sem demonstração. É claro que ele pode ser testado através da comparação entre suas conseqüências e os fatos experimentais). Aqui, nós não colocaremos todos os postulados da mecânica quântica de uma só vez e depois apresentaremos os teoremas (proposição científica que pode ser demonstrada. Formulação fechada de uma teoria, que pode ser obtida a partir dos postulados desta teoria através de uma seqüência finita de aplicação das regras de dedução) e corolários (proposição que se deduz imediatamente de outra já conhecida. Conseqüência necessária e evidente). Iremos apresentando os postulados e alguns teoremas à medida que formos familiarizando com os novos conceitos e com a nova matemática de espaços vetoriais abstratos.

4.2 KETS E OPERADORES

Já vimos a necessidade de considerarmos um espaço vetorial complexo. Agora vamos formular as bases matemáticas de espaços vetoriais como são usadas na mecânica quântica. Usaremos a notação de Dirac.

4.2.1 ESPAÇO KET

Consideraremos um espaço vetorial complexo. Dessa forma, precisamos saber qual a dimensão desse espaço e os tipos de vetores presentes. Com relação à dimensão de nosso espaço, podemos fazer algumas considerações se lembrarmos do experimento de Stern-Gerlach discutido nas aulas passadas. Vimos naquele caso particular dos átomos de prata, que quando um feixe de átomos saindo de um forno passava através de um campo magnético, emergiam apenas dois feixes que denotamos de spin-up e spin-down. Um breve raciocínio nos indica que o feixe original deva ser alguma combinação dos dois feixes emergentes. Assim, podemos escrever o feixe original como uma combinação linear dos feixes emergentes e devemos estabelecer as regras para essa combinação. Vimos que a idéia de um espaço vetorial se encaixa perfeitamente bem nessa história dos spins. Logo, se o feixe original de átomos de prata, que deve ser o feixe mais geral possível (pois apareceu de circunstâncias onde não havia qualquer controle com relação aos spins), pode ser escrito como uma combinação linear de apenas dois feixes "vetores" (up e down), então concluímos que esse espaço vetorial deva ter dimensão 2. Mas experimentos com outros tipos de átomos ou partículas levam a apenas um feixe emergente, ou três feixes emergentes etc, de maneira que é fácil concluir que em cada situação a dimensão do espaço vetorial deva ser diferente. De fato, a dimensão do espaço vetorial complexo em mecânica quântica é especificada de acordo com a natureza do sistema físico em questão. Podemos então fazer o seguinte resumo:

ESPAÇO VETORIAL COMPLEXO EM MECÂNICA QUÂNTICA

1. DIMENSÃO : depende da natureza do sistema físico em consideração.
2. UM VETOR NESSE ESPAÇO : representa um estado físico (por exemplo, um átomo de prata com orientação de spin definida). É chamado vetor estado e na notação de Dirac é denominado KET e simbolizado por $|\alpha>$.

Em nosso curso não iremos mais simbolizar um vetor por uma seta ou negrito. Estamos em um espaço vetorial abstrato e o vetor será simbolizado por um ket tal como $|\alpha>$. Com as definições acima estamos pronto para enunciarmos o primeiro postulado.

Primeiro Postulado: O estado **KET** contém toda a informação sobre o estado de um sistema físico.

Mas, já que estamos tratando com um espaço vetorial abstrato, precisamos estabelecer as regras que relacionam os diferentes vetores que formam esse espaço, isto é, precisamos de uma álgebra para esses vetores kets.

ÁLGEBRA

a) soma : $|\alpha> + |\beta> = |\gamma>$

b) produto por um número (complexo) : $c|\alpha> = |\beta>$, $c|\alpha> = |\alpha>c$.

Se c = 0, temos o KET NULO.

Aqui cabe mais um postulado, relacionado ao primeiro e que concerne à álgebra dos kets. Portanto, não acho conveniente enumera-lo e assim apenas o enunciarei e o sublinharei com cor diferente do que foi feito com o primeiro postulado.

Postulado : Os KETS $|\alpha>$ e $c|\alpha>$, $c \neq 0$ representam o mesmo estado físico.

Em outra palavras, somente a “direção” nesse espaço vetorial é de significado. Devido a essa falta de importância do “tamanho” do vetor na teoria, e para distingui-los das situações ordinárias, os matemáticos preferem dizer que estamos tratando com raios em vez de vetores.

Para continuarmos estabelecendo a álgebra dos kets, precisamos de mais algumas definições e postulados. Como estamos tratando de sistemas físicos, precisamos encaixar os observáveis (grandezas a serem medidas no laboratório) dentro dessa nova notação. Aqui eu introduzo o segundo postulado da mecânica quântica.

Segundo Postulado: Toda quantidade física mensurável é descrita por um **operador**, **tal como A**, atuando no espaço vetorial em questão; esse operador é um observável.

Devemos frisar aqui um pouco da notação a ser empregada. Um observável (posição, momento, componentes do spin etc) será sempre representado por um operador cujo símbolo é, em geral, uma letra latina maiúscula tal como A. Estamos prontos para continuarmos a álgebra do nosso espaço vetorial introduzindo nas regras o operador. Podemos agora definir o produto de um operador e um ket. **Em geral, o operador atua à esquerda do ket**.

ÁLGEBRA (continuação)

c) produto ket e operador: A. ($|\alpha>$) = A $|\alpha>$.

Note que a atuação de um operador em um ket, levará a outro ket. Mais tarde consideraremos mais definições sobre operação de multiplicação. Por enquanto, temos que tecer alguns comentários sobre o item (c) da álgebra do nosso espaço vetorial. Em geral, **A** $|\alpha> \neq$ **a** $|\alpha>$, onde **a** é um número complexo (em nossa notação, enquanto operadores são representados por letras latinas maiúsculas, números serão representados por letras latinas minúsculas). Entretanto, existem kets especiais de grande importância na teoria, conhecidos por autokets do operador A, denotados por $|a'>$, $|a''>$, $|a'''>$, ... , com a propriedade **A** $|a'> = a'|a'>$, **A** $|a''> = a''|a''>$, **A** $|a'''> = a'''|a'''>$, ..., onde **a’, a’’ , ...,** são apenas números. Note que a aplicação de **A** em um autoket, apenas reproduz o mesmo ket aparte de um número multiplicativo. O conjunto de números **{a’, a’’,...}**, mais compactamente **{ a’ }** é chamado autovalores do operador **A**. Note que os kets são representados por letras gregas, enquanto os autokets por letras latinas minúsculas com linhas. Os autovalores também são representados por letras latinas minúsculas com linhas, mas quando for necessário ordenar, é melhor usar **{ $a^{(1)}$, $a^{(2)}$, $a^{(3)}$,...}**. O estado físico correspondente a um autoket é chamado **autoestado.**

A discussão proposta neste parágrafo pode ser evitada pelo estudante sem o comprometimento do assunto (o conteúdo envolverá algumas idéias sobre spins já estudada em seu curso de estrutura da matéria). Antes de continuarmos com a álgebra, vamos fazer uma associação das idéias desenvolvidas até agora com o caso de sistemas de spin 1/ 2, relacionado com a experiência de Stern-Gerlach . Um experimento desse tipo pode ser usado para medirmos o spin de uma determinada partícula e quando falamos “spin1/2”, “spin 1” etc, queremos dizer que o valor do spin de determinada partícula vale respectivamente $\frac{1}{2}\hbar$, 1 $\hbar$ etc, onde $\hbar$ é a constante de Planck dividido por 2π. No caso particular do experimento de Stern-Gerlach, podemos dizer que os átomos de prata tem spin ½ e se quisermos determinar o valor da componente-z desse spin, encontramos os valores $\pm\frac{1}{2}\hbar$ (o valor positivo se refere ao feixe superior que emerge do campo magnético aplicado ao longo do eixo z, enquanto o valor negativo se refere ao feixe inferior). Visto que não existe uma direção preferencial no espaço, Isso também é verdadeiro para as componentes x e y. No caso de partículas de spin 1, devem emergir do campo magnético SG**z** três feixes (ver figura 8 abaixo) , um dos quais não sofre nenhum desvio, indicando que sua componente de spin S_z deva ser zero e os outros dois feixes carregam $S_z = \pm 1\hbar$. Note que a dimensão do nosso espaço vetorial para o sistema físico de partículas de spin 1 é três. Conclusões análogas podem ser estabelecidas para outros valores de spin. É bom lembrar

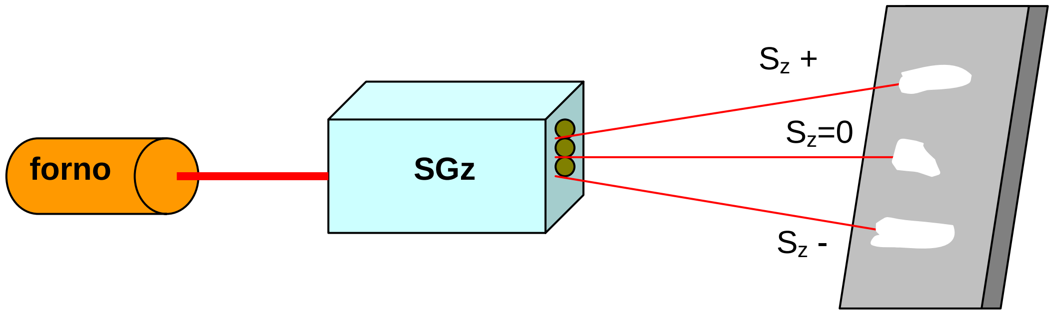


Fig. 8. Experimento de Stern-Gerlach para partículas de spin 1.

que a dimensionalidade do espaço vetorial é determinada pelo número de alternativas do experimento. Um espaço de dimensão N será expandido por N vetores que formam a sua base. Voltemos ao caso de spin ½. Quando medimos a componente S_z do spin, usando o aparato SG**z** encontramos os valores $\pm\hbar/2$ (ver Fig. 1). Como associar esse experimento físico com a matemática da mecânica quântica introduzida até agora? Vimos que um Ket representa um estado físico. Assim, cada um dos dois feixes que emergem do aparato SG**z** e que apresentam estados físicos diferentes (um tem spin up e outro spin down) devem ser representados por kets diferentes. Iremos denotá-los por **|S_z ; +>** e **|S_z ; - >.** E o que é um operador nessa história toda? Obviamente, o que se mede num experimento como esse, é a componente de spin. Assim, esses observáveis serão representados pelos operadores S_z, S_x, S_y. Agora suponha que queiramos medir a componente-z do spin. Para isso usamos um aparato SG**z** do qual emergirão dois feixes, e então bloqueamos o feixe de baixo (ver Fig. 9) . Para o feixe que sobrou (o feixe superior),representado pelo ket **|S_z ; +> ,** usamos novamente um aparato SG**z** e notamos que apenas um feixe emergirá desse segundo SG**z**, isto é, irá emergir exatamente um feixe no mesmo estado **|S_z ; +>.** Assim, ao fazermos uma medida do observável "componente–z do spin" representado pelo operador S_z sobre um estado previamente conhecido denotado por **|S_z ; +>,** notamos que a medida não alterou o estado **|S_z ; +>** e obtivemos o valor $\hbar/2$ para S_z. Nesse sentido, dizemos que $\hbar/2$ é um autovalor e que **|S_z ; +>** é um autoket (auto-estado) do operador S_z . O mesmo acontece com o estado

$|S_z;->$, só que nesse caso o autovalor é $-\hbar/2$. Em termos de nossa linguagem matemática podemos escrever para os sistemas de spin ½ :

S_z	$\vert S_z;+>$	=	$\frac{1}{2}\hbar$	$\vert S_z;+>$	S_z	$\vert S_z;->$	=	$-\frac{1}{2}\hbar$	$\vert S_z;->$
Operador	Autoket		Autovalor	Autoket	Operador	Autoket		Autovalor	Autoket

Sempre que uma medida de um observável for realizada sem que se altere o estado físico do sistema, dizemos que esse estado (que não foi alterado) é um auto estado do operador correspondente ao observável que está sendo medido. Se você está achando isso um tanto confuso, espere mais um pouquinho que as coisas tenderão a se encaixar. Com relação aos observáveis

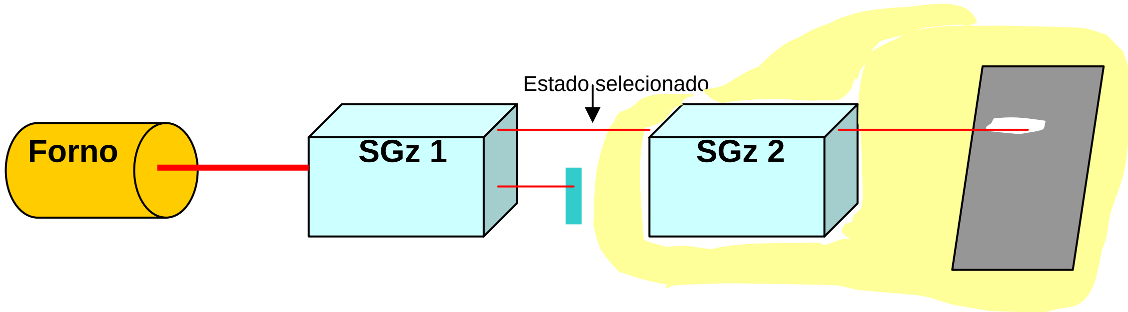


Fig.9. Dois aparatos SG**z** em seqüência. Essa figura tenta ilustrar o fato de que se você mede um observável sem alteração do estado físico, então o sistema se encontrava (antes da medida) em um autoestado (autoket) do operador representando o observável que está sendo medido. Note que a segunda medida da componente-z do spin através de SGz 2, não alterou o estado inicial selecionado .

S_x e S_y, relações semelhantes serão válidas:

$S_x \, \vert S_x;+> \; = \frac{1}{2}\hbar \, \vert S_x;+>$	$S_y \, \vert S_y;+> \; = \frac{1}{2}\hbar \, \vert S_y;+>$
$S_x \, \vert S_x;-> \; = -\frac{1}{2}\hbar \, \vert S_x;->$	$S_y \, \vert S_y;-> \; = -\frac{1}{2}\hbar \, \vert S_y;->$

Já comentamos que a dimensão do espaço vetorial é determinada pelo número de alternativas do experimento. No caso de sistemas de spin ½ só existem duas alternativas e consequentemente a dimensão é dois. Sistemas de dois estados (dimensão 2) são muito importantes e se você compreende bem tais sistemas não terá nenhum problema com sistemas de dimensões maiores (pois estes envolvem uma generalização). Um espaço vetorial de dimensão **N** é expandido por N autokets de um determinado observável A. Nesse espaço N-dimensional, qualquer ket poderá ser escrito como

$|\,\alpha > = \sum_{a'} c_{a'} \,|\, \mathbf{a'} >$, com a', a'' . a''', ..., $a^{(N)}$ e $c_{a'}$ são coeficientes complexos.

A questão da unicidade de tal expansão será adiada até ser provado a ortogonalidade dos autokets.

4.2.2 ESPAÇO BRA

Para prosseguirmos com a nossa álgebra, precisamos definir um novo espaço, chamado espaço BRA, que é “dual” ao espaço KET. Assim, vamos enunciar mais um postulado relacionado ao nosso espaço vetorial.

> Postulado: Para todo **KET** $|\alpha>$ existe um **BRA**, denotado por $<\alpha|$, neste espaço “dual”, ou espaço BRA.

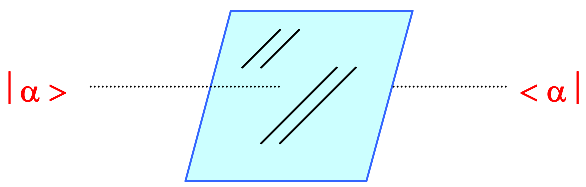
A correspondência é de um para um entre o espaço KET e o espaço BRA. Com isso queremos dizer que:

$$|\alpha> \xleftrightarrow{\textbf{CD}} <\alpha|$$

$$|a'>, |a''>, \ldots \xleftrightarrow{\textbf{CD}} <a'|, <a''|, \ldots$$

$$|\alpha> + |\beta> \xleftrightarrow{\textbf{CD}} <\alpha| + <\beta|$$

onde **CD** é a abreviação de correspondência dual. Podemos dizer que o espaço BRA é a imagem no espelho do espaço KET.



Relacionado a essa correspondência, enunciamos mais um postulado matemático (até agora só enunciamos dois postulados da mecânica quântica, os quais foram coloridos de azul. Os demais são postulados relacionados à álgebra e foram coloridos de amarelo).

> Postulado: O BRA “dual” a $c|\alpha>$ é $c^{*}<\alpha|$, (e não $c<\alpha|$). Assim, de maneira geral, temos
>
> $$c_{\alpha}|\alpha> + c_{\beta}|\beta> \xleftrightarrow{\textbf{CD}} c_{\alpha}^{*}<\alpha| + c_{\beta}^{*}<\beta|$$

4.2.3 PRODUTO INTERNO DE UM BRA E UM KET

Por definição, num produto interno de um BRA por um KET, o BRA fica à esquerda e o KET fica à direita e assim temos o BRAKET :

$$<\beta|\alpha> = (<\beta|) \bullet (|\alpha>)$$

Este produto é em geral um número complexo. A seguir, postulamos mais duas propriedades do produto interno:

Postulado: O produto interno obedece às seguintes propriedades :
1º) $< \beta | \alpha > = < \alpha | \beta >^*$
2º) $< \alpha | \alpha > \geq 0$

Fica claro, usando a primeira propriedade acima que $< \alpha | \alpha >$ é um número real. A segunda propriedade é algumas vezes conhecida como postulado da métrica definida positiva.

Dois KETS $|\alpha >$ **,** $|\beta >$ são ditos ortogonais se $< \alpha | \beta > = 0$. Essa é a condição de ortogonalidade. Com as definições acima, dado um ket não nulo $|\alpha >$**,** podemos formar um KET normalizado $|\tilde{\alpha} >$**,** fazendo

$$|\tilde{\alpha} > = [\, 1 / (< \alpha | \alpha >)^{1/2} \,]\ | \alpha >.$$

O termo $(< \alpha | \alpha >)^{½}$ é conhecido como a norma de $|\alpha >$**,** análogo ao modulo de um vetor $\sqrt{\vec{a}.\vec{a}}$ no espaço Euclidiano. Visto que apenas a direção é importante em nosso espaço KET, é conveniente requerer que todos KET's que usaremos para os estados físicos sejam normalizados.

Como estamos ainda no inicio do desenvolvimento de novos conceitos e nova matemática, teremos que esperar um pouco mais para fazermos problemas relacionados e fixar essas novas idéias. Enquanto isso, eu sugiro que os estudantes façam uma revisão da equação de Schrödinger aprendida no curso de Estrutura da Matéria e particularmente aconselho os seguintes problemas (que serão úteis em nosso estudo) :

4.3 PROBLEMAS (UMA REVISÃO)

PROBLEMA 1: Resolva a equação de Schrödinger para um oscilador harmônico encontrando as autofunções (autoestados) e autovalores da Hamiltoniana.

PROBLEMA 2: Resolva a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio encontrando as autofunções e os autovalores da Hamiltoniana.

PROBLEMA 3 (Desafio) : O análogo relativístico da equação de Schrödinger para um elétron de spin 0 (e portanto, não aplicável ao elétron real) é a versão de operadores da equação

$$(E - V)^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \,,$$

isto é,

$$\left(\frac{E}{\hbar c} - \frac{Ze^2}{\hbar c}\frac{1}{r} \right)^2 \psi = -\nabla^2 \psi + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \psi$$

(a) Justifique as duas equações acima (a segunda equação é conhecida como equação de Klein-Gordon).
(b) Determine a equação radial.
(c) Determine o espectro de autovalores. (Sugestão: note a estreita conexão entre a equação radial obtida no item (a) e a equação radial do problema do átomo de hidrogênio do problema 2.

FÍSICA QUÂNTICA I
(Aula 7: Conceitos Fundamentais; continuação)

5.1 OPERADORES

Dois operadores são iguais, $X = Y$, se $X|\alpha\rangle = Y|\alpha\rangle$ para todo KET $|\alpha\rangle$. Um operador é chamado operador nulo se $X|\alpha\rangle = 0$, com $|\alpha\rangle$ arbitrário. A adição de operadores é comutativa e associativa, isto é :
$X + Y = Y + X$ (propriedade comutativa)
$X + (Y + Z) = (X + Y) + Z$ (propriedade associativa) .

Dizemos que um operador é linear quando

$$X (c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle) = c_\alpha X|\alpha\rangle + c_\beta X|\beta\rangle .$$

Na aula passada, vimos que um operador atua num KET pela esquerda. Em um BRA, o operador atua pela direita , $(\langle\alpha|).X = \langle\alpha|X$. O resultado é outro BRA. Em geral, o KET $X|\alpha\rangle$ e o BRA $\langle\alpha|X$, não são duais. Definiremos o símbolo X^f tal que

$$\mathbf{X}|\alpha\rangle \xleftrightarrow{\text{CD}} \langle\alpha|\mathbf{X}^f \qquad (5.1)$$

onde X^f é chamado de Adjunto Hermitiano ou Adjunto de X . No caso especial em que $X = X^f$, X é denominado Operador Hermitiano.

5.2 MULTIPLICAÇÃO

Uma importante propriedade relacionada à multiplicação de operadores é que, em geral, ela não é comutativa : $XY \neq YX$. No entanto, ela é associativa : $X(YZ) = (XY)Z = XYZ$. Além disso temos:

$X(Y|\alpha\rangle) = (XY)|\alpha\rangle$.

$(\langle\beta|X)Y = \langle\beta|(XY) = \langle\beta|XY$.

Com o que foi visto até agora podemos provar que $(XY)^f = Y^f X^f$.

Prova : Lembramos que o produto de dois operadores é também um operador e portanto podemos escrever $(XY) = Z$. Usando a propriedade (5.1) para Z temos: $Z|\alpha\rangle \xleftrightarrow{\text{CD}} \langle\alpha|Z^f$, segue: $(XY)|\alpha\rangle = \langle\alpha|(XY)^f$. Mas
$XY|\alpha\rangle = X(Y|\alpha\rangle) \xleftrightarrow{\text{CD}} (\langle\alpha|Y^f)X^f = \langle\alpha|Y^f X^f$ e portanto $(XY)^f = Y^f X^f$.

Até agora definimos os produtos $\langle\beta|\alpha\rangle$, $X|\alpha\rangle$, $\langle\alpha|X$ e XY. Podemos então perguntar: existem outros tipos de produtos? A resposta é sim e vamos definir o chamado produto externo , onde o KET fica à esquerda do BRA, isto é: $(|\beta\rangle)(\langle\alpha|) = |\beta\rangle\langle\alpha|$. Note que o produto externo é um operador, pois

$$\underbrace{(|\beta\rangle\langle\alpha|)}_{\text{(produto externo)}}\ \underbrace{|\gamma\rangle}_{\text{(KET)}} = \underbrace{|\beta\rangle}_{\text{(KET)}}\ \underbrace{(\langle\alpha|\gamma\rangle)}_{\text{(número)}} = \langle\alpha|\gamma\rangle|\beta\rangle$$

Abaixo nós consideramos alguns exemplos de produtos ilegais, ou seja, produtos que não são permitidos em nosso formalismo. Os ilegais tem as seguintes formas: $|\alpha\rangle X$, $X\langle\alpha|$, não são nem BRA , nem KET e nem operador ; os produtos $|\alpha\rangle|\beta\rangle$ e $\langle\alpha|\langle\beta|$ são considerados ilegais quando os KET's (BRA's) pertencem ao mesmo espaço vetorial.

5.3 O AXIOMA ASSOCIATIVO DA MULTIPLICAÇÃO

Quando estivermos tratando com multiplicações legais entre BRA's , KET's e operadores, a propriedade associativa é postulada ser válida em geral. Como uma ilustração, escrevemos :
$(|\beta\rangle\langle\alpha|)\,.\,|\gamma\rangle = |\beta\rangle\,.\,(\langle\alpha|\gamma\rangle)$, onde **$(\langle\alpha|\gamma\rangle)$** é apenas um número. Logo, o produto externo atuando sobre um KET é só outro KET e portanto $|\beta\rangle\langle\alpha|$ pode ser considerado um operador. Note que o operador $|\beta\rangle\langle\alpha|$ gira $|\gamma\rangle$ na direção de $|\beta\rangle$.

É fácil ver que se o operador **$X = |\beta\rangle\langle\alpha|$**, então **$X^f = |\alpha\rangle\langle\beta|$.**

Prova : $X|\gamma\rangle \xleftrightarrow{CD} \langle\gamma|X^f$. Mas $X = |\beta\rangle\langle\alpha|$, de maneira que

$|\beta\rangle\langle\alpha|\gamma\rangle \xleftrightarrow{CD} \langle\gamma|(|\beta\rangle\langle\alpha|)^f$. Mas o primeiro membro pode ser escrito como $(\langle\alpha|\gamma\rangle)\,.\,|\beta\rangle$, pois $\langle\alpha|\gamma\rangle = c$ é só um número e pode ser colocado em qualquer posição. Assim, $(\langle\alpha|\gamma\rangle)\,.\,|\beta\rangle = c\,|\beta\rangle$. Lembrando que $c\,|\beta\rangle \xleftrightarrow{CD} \langle\beta|\,c^*$, e que $c^* = (\langle\alpha|\gamma\rangle)^* = \langle\gamma|\alpha\rangle$ (ver postulado sobre o produto interno), segue que $(\langle\alpha|\gamma\rangle)\,.\,|\beta\rangle$ tem o seguinte correspondente dual: $\langle\beta|\,.\,(\langle\gamma|\alpha\rangle) = (\langle\gamma|\alpha\rangle).\langle\beta|$. Mas pelo axioma associativo, a última expressão $(\langle\gamma|\alpha\rangle).\langle\beta| = \langle\gamma|\,(|\alpha\rangle\langle\beta|)$ e portanto mostramos que $(|\beta\rangle\langle\alpha|)^f = |\alpha\rangle\langle\beta|$.

Com o axioma associativo podemos ver também que $(\langle\beta|).(X|\alpha\rangle) = (\langle\beta|X).(|\alpha\rangle)$. Visto que os dois lados são iguais, podemos usar a forma compacta : $\langle\beta|X|\alpha\rangle$. Com essa notação segue ainda:

$\langle\beta|X|\alpha\rangle = \langle\beta|(X|\alpha\rangle) = \{(\langle\alpha|X^f).|\beta\rangle)\}^* = \langle\alpha|X^f|\beta\rangle^*$ e se X é Hermitiano $\langle\beta|X|\alpha\rangle = \langle\alpha|X|\beta\rangle^*$.

5.4 BASE DE KETS E REPRESENTAÇÃO POR MATRIZES

5.4.1 AUTOKETS DE UM OBSERVÁVEL

Consideremos os autokets e autovalores de um operador Hermitiano A. Aqui o símbolo A ,que foi reservado anteriormente para um observável, será usado para operadores Hermitianos, pois em mecânica quântica, operadores Hermitianos freqüentemente representam algum observável físico. Com esse operador Hermitiano em mente e com as regras estabelecidas até agora, vamos demonstrar o primeiro teorema.

TEOREMA: Os autovalores de um operador Hermitiano A são Reais; Os autokets de A correspondendo aos diferentes autovalores são ortogonais.

PROVA: Lembrando que $A|a'\rangle = a'|a'\rangle$, e sabendo que A é Hermitiano (enunciado), temos o seguinte dual para a equação de autovalores acima : $\langle a''|A^f = \langle a''|A = a''^*\langle a''|$, onde a', a'' , ... são os autovalores de A. Multiplicando ambos os lados de $A|a'\rangle = a'|a'\rangle$ por $\langle a''|$ pela esquerda, e ambos os lados de $\langle a''|A = a''^*\langle a''|$ por $|a'\rangle$ pela direita, temos :

$$< a'' | A | a' > = a' < a'' | a' >, \qquad (5.2)$$
$$< a'' | A | a' > = a''^{*} < a'' | a' > . \qquad (5.3)$$
Subtraindo as equações (1) – (2) segue
$$(a' - a''^{*}) < a'' | a' > = 0. \qquad (5.4)$$
Mas a' e a'' podem ser considerados iguais ou diferentes. Primeiro, consideremos a situação em que eles são iguais. Neste caso, $< a'' | a' >$ deve ser não nulo, pois estamos considerando os autokets não nulos e portanto, da equação (3) $a' - a''^{*} = 0$, ou $a' = a''^{*}$ e assim, os autovalores de A são Reais. Visto que esses autovalores são Reais, podemos escrever a equação (3) como $(a' - a'') < a'' | a' > = 0$. Agora, se considerarmos que os autovalores são diferentes, segue da equação acima que $< a'' | a' > = 0$ (se $a' \neq a''$). Logo, os autokets são ortogonais. □

Nós esperamos do ponto de vista físico que um observável tenha autovalores Reais, um ponto que ficará mais claro na próxima aula, onde discutiremos o processo de medida em mecânica quântica. Este teorema garante que os autovalores são Reais se o operador é Hermitiano. Esse é o motivo de falarmos em observáveis Hermitianos em mecânica quântica.

É conveniente normalizar os autokets $| a' >$ de maneira que $\{| a' >\}$ forme um **CONJUNTO ORTONORMAL :**

$$< a'' | a' > = \delta_{a'' a'} . \qquad (5.5)$$

Desde o inicio de nossa discussão sobre o espaço KET, estamos dizendo que tal espaço é expandido pelos autokets de um operador Hermitiano A. Então, por construção, os autokets de A formam um conjunto completo de nosso espaço KET.

5.4.2 AUTOKETS COMO UMA BASE

Vimos que os autokets normalizados de A formam um conjunto completo ortonormal (ver eq. (5.5)). Assim, um KET arbitrário pode ser expandido em termos dos autokets de A como segue:
$$| \psi > = \sum_{a'} c_{a'} | a' > . \qquad (5.6)$$
Isso é semelhante a expansão de um vetor arbitrário $\vec{V}$ em termos dos vetores unitários e mutuamente ortogonais $\hat{e}_i$ no espaço Euclidiano. Consideremos o KET abaixo
$$| \alpha > = \sum_{a'} c_{a'} | a' >. \qquad (5.7)$$
Multiplicando (5.7) por $< a'' |$ pela esquerda e usando a propriedade de ortonormalidade (4), podemos obter imediatamente os coeficientes da expansão,
$$< a'' | \alpha > = < a'' | \sum_{a'} c_{a'} | a' > = \sum_{a'} c_{a'} < a'' | a' > = \sum_{a'} c_{a'} \delta_{a'a''}$$
e o segundo termo é não nulo apenas quando a' = a'' . Logo
$$\boxed{c_{a'} = < a' | \alpha >}. \qquad (5.8)$$

Inserindo (5.8) em (5.7) temos, $|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle c_{a'} = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle$.

Logo um determinado KET pode ser escrito em termos dos autokets de um operador A como segue:

$$\boxed{|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle}. \qquad (5.9)$$

A expressão acima é análoga à expansão de um vetor $\vec{V}$ no espaço Euclidiano Real

$$\boxed{\vec{V} = \sum_i \hat{e}_i (\hat{e}_i \bullet \vec{V})} \quad , \qquad \hat{e}_i \bullet \vec{V} = V_i .$$

Note que os autokets $|a'\rangle$ sendo normalizados, indicam apenas uma direção no espaço KET, da mesma forma que os vetores unitários $\hat{e}_i$ indicam as direções x,y e z no espaço Euclidiano. Voltando à equação (5.9) e usando o axioma associativo da multiplicação temos que

$(|a'\rangle)(\langle a'|\alpha\rangle) = (|a'\rangle\langle a'|)|\alpha\rangle$.

(KET) (número) (operador) (KET)

Visto que $|\alpha\rangle$ é arbitrário, segue $|\alpha\rangle = (\sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|)|\alpha\rangle$ e portanto, o termo entre parêntesis deve ser o operador identidade , isto é

$$\boxed{\sum_{a'} |a'\rangle\langle a'| = \mathbf{1},} \qquad (5.10)$$

onde o **1** (em negrito) deve ser entendido como operador identidade. A relação (5.10) é conhecida como relação de completeza ou relação de clausura. Essa relação é muito útil, pois dada uma cadeia de KETS, BRAS e operadores multiplicados de maneira legal, a eq. (5.10) pode ser inserida em qualquer posição nessa cadeia, conforme a nossa conveniência. Considere, por exemplo, o produto BRAKET $\langle\alpha|\alpha\rangle$,

$\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\alpha|(\sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|)|\alpha\rangle = \sum_{a'} (\langle\alpha||a'\rangle\langle a'||\alpha\rangle) = \sum_{a} (\langle\acute{a}'||\alpha\rangle^* \langle a'||\alpha\rangle)$, ou seja

$$\boxed{\langle\alpha|\alpha\rangle = \sum_{a'} |\langle a'||\alpha\rangle|^2} \qquad (5.11)$$

Aqui, vocês podem fazer uma analogia com a norma de um vetor no espaço Euclidiano, $|\vec{V}|^2 = V_x{}^2 + V_y{}^2 + V_z{}^2$.

A eq. (5.11) mostra que se $|\alpha\rangle$ é normalizado, então os coeficientes $c_{a'}$ dados pela expressão (5.8) devem satisfazer

$1 = \langle\alpha|\alpha\rangle = = \sum_{a'} |\langle a'||\alpha\rangle|^2 = \sum_{a'} |c_{a'}|^2$, ou seja :

$$\boxed{\sum_{a'} |c_{a'}|^2 = 1} \quad . \qquad (5.12)$$

Na eq. (5.10), existe um produto externo e portanto um operador $|a'\rangle\langle a'|$, o qual daremos o nome de operador projeção pela razão que se apresenta a seguir. Deixemos esse operador atuar sobre um KET $|\alpha\rangle$ qualquer.

$$(|a'\rangle\langle a'|)\,.\,|\alpha\rangle = |a'\rangle(\langle a'|\alpha\rangle) = c_{a'}|a'\rangle\,. \qquad (5.13)$$

Note que a eq.(5.13) indica $(|a'\rangle\langle a'|)$ seleciona aquela porção do KET $|\alpha\rangle$ que é paralelo a $|a'\rangle$. Dessa forma, o operador $|a'\rangle\langle a'|$ é conhecido como operador projeção na direção do ket da base $|a'\rangle$ e é denotado por $\Lambda_{a'}$.

$$\Lambda_{a'} \equiv |a'\rangle\langle a'| \quad , \quad \text{operador projeção}\,. \qquad (5.14)$$

Usando a relação de clausura, segue

$$\boxed{\sum_{a'} \Lambda_{a'} = \mathbf{1}} \quad . \qquad (5.15)$$

5.4.3 REPRESENTAÇÃO POR MATRIZES

Tendo especificado uma base de autokets $\{|a'\rangle\}$ do operador A, vamos agora mostrar como representar um operador qualquer, digamos X, por uma matriz quadrada nessa mesma base. Vejamos ! Na base $\{|a'\rangle\}$, X pode ser escrito como

$$X = \sum_{a''}\sum_{a'} |a''\rangle\langle a''|X|a'\rangle\langle a'|\,, \qquad (5.16)$$

onde usamos a relação de clausura duas vezes. Note que se N é a dimensão do nosso espaço KET (isto é, existem N autokets de A), então existirão N^2 números da forma $\langle a''|X|a'\rangle$. Por exemplo, se N =2, teremos quatro números do tipo : $\langle a'|X|a'\rangle$, $\langle a'|X|a''\rangle$, $\langle a''|X|a'\rangle$, $\langle a''|X|a''\rangle$. Obviamente, esses números podem ser arranjados em uma matriz quadrada $N\times N$ como segue

$$\underset{\text{linha}}{\langle \mathbf{a''}}|\mathbf{X}|\underset{\text{coluna}}{\mathbf{a'}\rangle}. \qquad (5.17)$$

Explicitamente:

$$X \doteq \begin{bmatrix} \langle a^{(1)}|X|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(1)}|X|a^{(2)}\rangle & \cdots \\ \langle a^{(2)}|X|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(2)}|X|a^{(2)}\rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}, \qquad (5.18)$$

onde o símbolo $\doteq$ significa "é representado por " .

Já vimos que $\langle a''|X|a'\rangle = \langle a'|X^{f}|a''\rangle^{*}$. Logo, a operação adjunto Hermitiana, originalmente definida por $X|\alpha\rangle \overset{CD}{\longleftrightarrow} \langle\alpha|X^{f}$, está relacionada ao conceito mais familiar de "transposto conjugado complexo". Note que para um outro operador Hermitiano B temos $\langle a''|B|a'\rangle = \langle a'|B|a''\rangle^{*}$.

A maneira de arranjarmos $\langle a''|X|a'\rangle$ em uma matriz quadrada está em acordo com a regra usual de multiplicação de matrizes. Veja o exemplo: se Z= XY, $\langle a''|Z|a'\rangle = \langle a''|XY|a'\rangle =$

$$\sum_{a'''} \langle a''|X|a'''\rangle\langle a'''|Y|a''\rangle, \qquad (5.19)$$

onde inserimos o operador identidade (dado pela relação de clausura (5.10)) entre os operadores X e Y. Faça um teste e verifique que (5.19) obedece a mesma regra de multiplicação de matrizes.

Vejamos agora o seguinte produto de um operador e um KET:

$$|\gamma> = X|\alpha> \tag{5.20}$$

Essa relação também pode ser escrita em termos dos nossos kets da base $\{|\ a'>\}$. A expansão dos coeficientes $|\gamma>$ pode ser obtida por multiplicar $< a'|$ à esquerda de (5.20) : $< a'|\ \gamma > = < a'|X|\alpha >$, ou

$$< a'|\gamma > = \sum_{a''} < a'|X|a'' >< a''|\alpha > . \tag{5.21}$$

A relação acima pode ser vista como uma aplicação da regra de multiplicar uma matriz quadrada $< a'|X|a'' >$ por uma matriz coluna $< a'|\alpha >$. Assim, os coeficientes da expansão de $|\alpha>$ e $|\gamma>$ podem se arranjados na forma de matrizes coluna como mostramos abaixo:

$$|\alpha\rangle \doteq \begin{bmatrix} \langle a^{(1)}|\alpha\rangle \\ \langle a^{(2)}|\alpha\rangle \\ \langle a^{(3)}|\alpha\rangle \\ \vdots \end{bmatrix} \quad , |\gamma\rangle \doteq \begin{bmatrix} \langle a^{(1)}|\gamma\rangle \\ \langle a^{(2)}|\gamma\rangle \\ \langle a^{(3)}|\gamma\rangle \\ \vdots \end{bmatrix} . \tag{5.22}$$

Assim, os coeficientes de expansão dos KETS em termos de uma base $\{| a' >\}$ formam uma matriz coluna. Igualmente, o BRA $<\gamma| = <\alpha|X$ pode ser representado por uma matriz linha como segue :

$$\langle\gamma| \doteq \left[\langle\gamma|a^{(1)}\rangle \quad \langle\gamma|a^{(2)}\rangle \quad \langle\gamma|a^{(3)}\rangle \quad \ldots\right] = \left[\langle a^{(1)}|\gamma\rangle^* \quad \langle a^{(2)}|\gamma\rangle^* \quad \langle a^{(3)}|\gamma\rangle^* \quad \ldots\right] \tag{5.23}$$

Note o aparecimento da conjugação complexa quando os elementos da matriz coluna são escritos como (5.23).

A idéia de matriz pode ser vista mais claramente considerando

$$\underbrace{<a'|\gamma>}_{\text{matriz coluna Nx1}} = \sum_{a''} \underbrace{<\alpha|X|a''>}_{\text{matriz quadrada NxN}} \quad \underbrace{<a''|\alpha>}_{\text{matriz coluna Nx1}}$$

$$\underbrace{<\gamma|\ a'>}_{\text{matriz linha 1x N}} = \sum_{a''} \underbrace{<\alpha|a''>}_{\text{matriz linha 1xN}} \quad \underbrace{<a''|X|a'>}_{\text{matriz quadrada NxN}}$$

Fica claro que o produto interno $< \beta\ |\alpha >$ pode ser escrito como o produto de uma matriz linha, representando $< \beta|$, por uma matriz coluna, representando $|\alpha >$:

$$\langle\beta|\alpha\rangle \doteq \sum_{a'}\langle\beta|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle = \left[\langle a^{(1)}|\beta\rangle^* \quad \langle a^{(2)}|\beta\rangle^* \quad \ldots\right]\begin{bmatrix} \langle a^{(1)}|\alpha\rangle \\ \langle a^{(2)}|\alpha\rangle \\ \vdots \end{bmatrix}, \tag{5.24}$$

Note que se multiplicarmos a matriz linha ,representando $< \alpha\ |$ pela matriz coluna, representando $|\ \beta >$, obtemos exatamente o conjugado complexo da expressão (5.24), o que é consistente com a propriedade fundamental do produto interno $< \alpha| \beta > = < \beta| \alpha >^*$.

Finalmente, consideremos o produto externo $|\beta >< \alpha|$. Como podemos representa-lo por matrizes ? Vejamos!

$|\beta>< \alpha| = \sum_{a'}\sum_{a''}|a'\rangle\langle a|\beta\rangle\langle\alpha|a''\rangle\langle a''|$, ou seja

$$|\beta\rangle\langle\alpha| \doteq \begin{bmatrix} \langle a^{(1)}|\beta\rangle\langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* & \langle a^{(1)}|\beta\rangle\langle a^{(2)}|\alpha\rangle^* & \dots \\ \langle a^{(2)}|\beta\rangle\langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* & \langle a^{(2)}|\beta\rangle\langle a^{(2)}|\alpha\rangle^* & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}. \qquad (5.25)$$

A representação por matriz de um observável A é particularmente simples se os autokets de A são os próprios autokets usados como a base. Assim temos $A = \sum_{a}\sum_{á''} |a''\rangle\langle a''|A|a'\rangle\langle a'|$. No entanto, obviamente a matriz $\langle a''|A|a'\rangle$ é diagonal, $\langle a''|A|a'\rangle = \langle a''|A|a'\rangle\delta_{a'a''} = a'\delta_{a'a''}$. Assim,

$$A = \sum_{a'} a'|a'\rangle\langle a'| = \sum_{a'} a'\Lambda_{a'} \,. \qquad (5.26)$$

5.4.4 EXEMPLO COM SISTEMAS DE SPIN ½

Aqui será instrutivo darmos um exemplo de como toda essa matemática se relaciona com problemas físicos. Consideraremos mais uma vez o caso especial de sistemas de spin ½ . Lembramos que

1) vetores da base : $|S_z;+\rangle$, $|S_z;-\rangle$ (espaço vetorial de dimensão 2)

3) Essa base é formada pelos autokets do operador S_z .

Por uma questão de simplicidade, representaremos os vetores da base de S_z por $|+\rangle$, $|-\rangle$ (isto é, usamos $|S_z;+\rangle = |+\rangle$ e $|S_z;-\rangle = |-\rangle$). O operador mais simples no espaço KET expandido pelos kets da base $|+\rangle$ e $|-\rangle$ é obviamente o operador identidade

$$\boxed{\mathbf{1} = |+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|}\,. \qquad (5.27)$$

De acordo com a expressão (5.26), podemos expandir S_z em termos de seus autokets como

$$\boxed{S_z = \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|)}\,. \qquad (5.28)$$

A relação autoket-autovalor segue imediatamente da propriedade de ortonormalidade de $|+\rangle$, $|-\rangle$. Exemplo: apliquemos S_z dado por (5.28) no KET $|+\rangle$. Assim, temos

$$S_z|+\rangle = \frac{\hbar}{2}\big(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|\big)|+\rangle = \frac{\hbar}{2}|+\rangle\langle+|+\rangle - \frac{\hbar}{2}|-\rangle\langle-|+\rangle = \frac{\hbar}{2}|+\rangle.$$

É instrutivo considerar dois operadores não Hermitianos definidos por

$$S_+ \equiv \hbar\,|+\rangle\langle-| \;,\; S_- \equiv \hbar\,|-\rangle\langle+| \,. \qquad (5.29)$$

Exercício: mostre que os operadores em (5.29) não são Hermitianos.

Note que da definição (5.29) temos $\mathbf{S_+|-\rangle = \hbar\,|+\rangle\langle-|-\rangle = \hbar\,|+\rangle}$, isto é, o operador S_+ atuando sobre o ket spin-down ($|-\rangle$) , o transforma em um ket spin-up ($|+\rangle$) multiplicado por $\hbar$. Por outro lado $\mathbf{S_+|+\rangle = 0}$. A interpretação física desse resultado, é que S_+ levanta a componente de spin por uma unidade de $\hbar$; se a componente de spin não puder mais ser levantada, automaticamente S_+ levará a um ket nulo. Da mesma forma, S_- pode ser interpretado como um operador que abaixa a componente de spin por uma unidade. Mais tarde nesse curso, mostraremos que $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$.

Para construirmos as representações matriciais dos operadores de momento angular, é costume indicar a coluna (linha) na ordem decrescente das componentes de momento angular. Assim, no caso de spin ½ , temos

$$|+\rangle \doteq \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \ , \quad |-\rangle \doteq \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$S_z \doteq \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \ , \quad S_+ \doteq \hbar\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad , \ S_- \doteq \hbar\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$