Formalismo de Dirac para a Mecânica Quântica

Cálculo vetorial em $\mathcal{E}$

- Primeiro passo: Notação de Dirac.

  Os elementos de $\mathcal{E}$ são chamados de kets e representados por: $|\ \ \rangle$. Entre eles coloca-se um símbolo que caracteriza o ket: $|\psi\rangle$. Com isso, pode-se criar para

$$\boxed{\forall\ \psi(\vec{r}) \in \mathfrak{F} \Longrightarrow |\psi\rangle \in \mathcal{E}_{\vec{r}}}$$

- $|\psi\rangle$ não tem dependência em $\vec{r}$. A idéia é que:

$$\psi(\vec{r}) \begin{cases} \text{Seja interpretado como um conjunto da componentes de } |\psi\rangle \\ \text{em uma base particular, onde } \vec{r}, \text{ faz papel de índice.} \end{cases}$$

- Define-se *produto escalar* a partir de um par de kets, $|\psi\rangle$ e $|\varphi\rangle$ por: $\underbrace{(|\psi\rangle, |\varphi\rangle)}$.

  Os produtos deve respeitar as propriedades:

essa notação vai melhorar

$$\boxed{\begin{array}{l} (1)\ (|\psi\rangle, |\varphi\rangle) = (|\varphi\rangle, |\psi\rangle)^\star \\ (2)\ (|\varphi\rangle, \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1(|\varphi\rangle, |\psi_1\rangle) + \lambda_2(|\varphi\rangle, |\psi_2\rangle) \\ (3)\ (\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle, |\varphi\rangle) = \lambda_1^\star|(|\psi_1\rangle, |\varphi\rangle) + \lambda_2^\star(|\psi_2\rangle, |\varphi\rangle) \end{array}}$$

Formalismo de Dirac para a Mecânica Quântica

- Define-se *o espaço dual* $\mathcal{E}^\star$ de $\mathcal{E}$.

  Os elementos do espaço dual serão chamados de "bras". Para definir os *bras* começamos, inspirados no produto escalar entre funções de onda, já definido a partir de $(\phi,\psi) = \int d^3r \phi^\star(\vec{r})\psi(\vec{r}),$ pela criação de um funcional linear que: dado $|\psi\rangle \in \mathcal{E}, \exists\ \chi$ que associa o ket à um número complexo $c,$ onde $c = \chi(|\psi\rangle)$.
  Isso é feito de maneira similar à operação: dado $\psi(\vec{r}) \in L^2 \to (\phi,\psi) = c$. Neste caso tivemos ajuda de $\phi^\star(\vec{r})$. O *bra* será seu equivalente em $\mathcal{E}^\star$.
  Assim definimos $\chi,$ um funcional linear que leva $|\psi\rangle \in \mathcal{E} \xrightarrow{\chi} c,$ à um número complexo. Essa operação respeita a propriedade de linearidade, isto é

  $$\chi(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1\chi(|\psi_1\rangle) + \lambda_2\chi(|\psi_2\rangle) = \lambda_1 c_1 + \lambda_2 c_2 \text{ onde } \begin{cases}\chi(|\psi_1\rangle) = c_1\\ \chi(|\psi_2\rangle) = c_2\end{cases}$$

  O conjunto de funcionais lineares formam por si só um espaço vetorial, o espaço dual de $\mathcal{E}$ simbolizado por $\mathcal{E}^\star$.

Cuidado para não confundir funcional linear com operador linear!
Um associa kets à números complexos e o outro associa kets à kets.
Ambos são lineares.

Formalismo de Dirac para a Mecânica Quântica

- *Os bras.*
  A notação será $\langle\ \ |$. Para o funcional linear χ, o bra será representado por $\langle\chi|$. A ação de χ sobre $|\psi\rangle$ será representada por $\langle\chi|\psi\rangle$. Aqui surge o termo bracket.
- Correspondência entre kets e bras.
  Para cada ket existe um bra correspondente, ou seja, para $\forall\ |\phi\rangle \in \mathcal{E}\ \exists\ \langle\phi| \in \mathcal{E}^\star$.
- Considerando o funcional como um produto escalar, temos $\langle\phi|\psi\rangle \equiv (|\phi\rangle, |\psi\rangle)$, e pedimos que exista para todos os $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ e $\therefore$ $\langle\phi|$ está assim definido como um funcional linear (ao atuar num ket produz um número complexo).
- Essa correspondência é anti-linear (ver aula 3). Digamos que a gente queira encontrar o bra associado ao ket $\lambda_1|\varphi_1\rangle + \lambda_2|\varphi_2\rangle$. Para isso, tome $(\lambda_1|\varphi_1\rangle + \lambda_2|\varphi_2\rangle, |\psi\rangle) = \lambda_1^\star(|\varphi_1\rangle, |\psi\rangle) + \lambda_2^\star(|\varphi_2\rangle, |\psi\rangle)$, onde apenas aplicamos as regras de produto escalar. Em seguida, use a definição para obter: $(\lambda_1|\varphi_1\rangle + \lambda_2|\varphi_2\rangle, |\psi\rangle) = \lambda_1^\star\langle\varphi_1|\psi\rangle + \lambda_2^\star\langle\varphi_2|\psi\rangle$, o que permite achar a seguinte correspondência:

$$\boxed{\underbrace{\lambda_1|\varphi_1\rangle + \lambda_2|\varphi_2\rangle}_{\text{ket de } \mathcal{E}} \Longleftrightarrow \underbrace{\lambda_1^\star\langle\varphi_1| + \lambda_2^\star\langle\varphi_2|}_{\text{bra de } \mathcal{E}^\star}}$$

relação antilinear

Formalismo de Dirac para a Mecânica Quântica

Comentário:

Se $\begin{cases} \lambda \text{ é complexo} \\ |\psi\rangle \text{ é um ket} \end{cases} \Longrightarrow \lambda|\psi\rangle$ é um ket, as vezes representado por $|\lambda\psi\rangle$

Cuidado. O bra associado à $|\lambda\psi\rangle$ é $\lambda^*\langle\psi|$.

- *O produto escalar na notação de Dirac é* $\langle\phi|\psi\rangle$, definido por $(|\phi\rangle, |\psi\rangle)$.

  Algumas propriedades conhecidas nesta notação:

  (1) $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^\star$.

  (2) $\langle\varphi|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1\langle\varphi|\psi_1\rangle + \lambda_2\langle\varphi|\psi_2\rangle$.

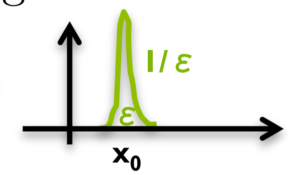
  (3) $\langle\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2|\varphi\rangle = \lambda_1^\star\langle\psi_1|\varphi\rangle + \lambda_2^\star\langle\psi_2|\varphi\rangle$.

  (4) $\langle\psi|\psi\rangle \longrightarrow$ é real positivo e é zero só se $|\psi\rangle = 0$.

- *Existe um bra para cada ket. Será existe um ket para cada bra?*

  De fato, não. Mas veremos que isso não será um problema. Em seguida apresentaremos alguns exemplos para ilustrar isso.

Exemplo 1:



Seja, $\xi_{x_0}^{(\epsilon)}(x)$, uma função real, contínua, tal que $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \xi_{x_0}^{(\epsilon)}(x) = 1$.

Tem a forma de um pico de altura $1/\epsilon$, largura ϵ e centrada em x_0.

Formalismo de Dirac para a Mecânica Quântica

Comentário:

se ϵ finito

Note que se $\epsilon \neq 0,\ \xi_{x_0}^{(\epsilon)}(x) \in \mathfrak{F}$ (a norma$^2 = 1/\epsilon \rightarrow$ use normalização igual à $\epsilon^{1/2}$).
Chame de $|\xi_{x_0}^{(\epsilon)}\rangle$ o ket correspondente à $\xi_{x_0}^{(\epsilon)}(x)$. Se $\epsilon \neq 0$ $|\xi_{x_0}^{(\epsilon)}\rangle \in \mathcal{E}_x$. E o bra $\in \mathcal{E}_x^\star$?
O bra $\langle\xi_{x_0}^{(\epsilon)}|$ associado à esse ket $\in \mathcal{E}_x^\star$. Isto por que para $\forall|\psi\rangle \in \mathcal{E}_x,$ o produto escalar $\langle\xi_{x_0}^{(\epsilon)}|\psi\rangle = (\xi_{x_0}^{(\epsilon)}, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \xi_{x_0}^{(\epsilon)}(x)\psi(x)$ está bem definido. Note que quando $\epsilon \rightarrow 0 \Rightarrow \xi_{x_0}^{(\epsilon)}(x) \rightarrow \xi_{x_0}(x) \notin \mathfrak{F}_x$ uma vez que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\xi_{x_0}(x)|^2 = \lim_{\epsilon\rightarrow 0}\int_{-\infty}^{+\infty} |\xi_{x_0}^{(\epsilon)}(x)|^2 = \lim_{\epsilon\rightarrow 0}\frac{1}{\epsilon} = \infty \text{ (diverge)}.$$

Por outro lado, mesmo quando $\epsilon \rightarrow 0$ a integral $\int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \xi_{x_0}^{(\epsilon)}(x)\psi(x)$ continua bem definida (e igual à $\psi(x_0)$). Assim, $\langle\xi_{x_0}^{(\epsilon)}|,$ mesmo para $\epsilon \rightarrow 0,$ continua sendo um bra. Em outras palavras $\langle\xi_{x_0}|$ existe, mas não tem um ket correspondente.

$$\boxed{\textit{Para concluir isso, usamos} \begin{cases} Se\ \langle\varphi|\varphi\rangle = converge \Rightarrow |\varphi\rangle \in \mathcal{E}. \\ \\ Se\ \langle\varphi|\psi\rangle = converge\ \forall|\psi\rangle \in \mathcal{E} \Rightarrow \langle\varphi| \in \mathcal{E}^\star. \end{cases}}$$

Formalismo de Dirac para a Mecânica Quântica

Exemplo 2:

Onda Plana truncada.

Seja, $v_{p_0}^{(L)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}}$ para $-\frac{L}{2} \leq x \leq +\frac{L}{2}$ e indo à zero rapidamente fora deste intervalo.

Seja, $|v_{p_0}^{(L)}\rangle$ o ket associado com $v_{p_0}^{(L)}(x)$. Vale que: $\boxed{v_{p_0}^{(L)}(x) \in \mathfrak{F}_x \Longleftrightarrow |v_{p_0}^{(L)}\rangle \in \mathcal{E}_x.}$

se L finito, é normalizável!

Note que o quadrado da norma de $v_{p_0}^{(L)}(x)$ é $\int_{-L/2}^{+L/2} dx \left|\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}}\right|^2 = \frac{L}{2\pi\hbar}$ e para $L \to \infty$ isso diverge. Assim, seguindo a lógica da caixa azul do slide anterior,

$$\lim_{L\to\infty} \langle v_{p_0}^{(L)}|v_{p_0}^{(L)}\rangle \text{ diverge } \therefore \lim_{L\to\infty} |v_{p_0}^{(L)}\rangle \notin \mathcal{E}_x.$$

Agora, considere o bra $\langle v_{p_0}^{(L)}|$ associado com $|v_{p_0}^{(L)}\rangle$. Para cada $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_x$, podemos escrever $\langle v_{p_0}^{(L)}|\psi\rangle = \int_{-L/2}^{+L/2} dx \, \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{-ip_0 x}{\hbar}} \psi(x)$ e $\lim_{L\to\infty} \langle v_{p_0}^{(L)}|\psi\rangle = \bar{\psi}(p_0)$ que é o valor da bem definida transformada de Fourier, $\bar{\psi}(p)$, de $\psi(x)$, em $p = p_0$. Assim

concluímos, quando $L \to \infty$ $\begin{cases} \langle v_{p_0}^{(L)}| \in \mathcal{E}_x^\star \\ \\ |v_{p_0}^{(L)}\rangle \notin \mathcal{E}_x \end{cases}$ $\therefore$ $\exists$ o bra, mas $\nexists$ o ket.

Comentário sobre os dois exemplos

Esta quebra de simetria está relacionada com a existência de bases contínuas para descrever $\mathfrak{F}_x$. Uma vez que estas funções de base não pertencem à $\mathfrak{F}_x$, nós não podemos associar um ket de $\mathcal{E}_x$ à essas funções.

Note, entretanto, que o produto escalar destas funções com funções de $\mathfrak{F}_x$ está bem definido, permitindo assim associar um funcional linear à estas funções que é o bra que pertence à $\mathcal{E}_x^\star$.

Para salvar a simetria, criaremos a figura de ket generalizado. Para isso, esqueça que as funções não pertencem à $\mathfrak{F}$ e defina estados não físicos,

$$\text{onde} \left\{ \begin{array}{ccc} |\xi_{x_0}\rangle & \text{e} & |v_{p_0}\rangle \\ \downarrow & & \downarrow \\ \xi_{x_0}(x) & & v_{p_0}(x) \end{array} \right. \quad \text{e} \quad \left\{ \begin{array}{l} |\xi_{x_0}\rangle \text{ é } |\xi_{x_0}^{(\epsilon)}\rangle \text{ quando } \epsilon << \forall \text{ outra grandeza.} \\ \\ |v_{p_0}\rangle \text{ é } |v_{p_0}^{(L)}\rangle \text{ quando } L >> \forall \text{ outra grandeza.} \end{array} \right.$$

Faça as contas com $|\xi_{x_0}^{(\epsilon)}\rangle$ ou $|v_{p_0}^{(L)}\rangle$ e tome o limite no fim!

Será que $\{\xi_{x_0}^{(\epsilon)}(x)\}$ e $\{v_{p_0}^{(L)}(x)\}$ satisfazem a relação de completeza? De certa forma, sim, pois $\int dx_0\, \xi_{x_0}^{(\epsilon)}(x)\xi_{x_0}^{(\epsilon)}(x')$ é uma função de $x-x'$ e $\approx \delta(x-x')$.

O mesmo vale para $\{v_{p_0}^{(L)}(x)\}$.

Formalismo de Dirac para a Mecânica Quântica

- *Operadores Lineares*

Definição: Para cada ket $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$, $\exists$ um outro ket $|\psi'\rangle \in \mathcal{E}$, tal que

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$$

Propriedades de operadores lineares e alguns comentários:

(1) Linearidade.

$$A(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1 A|\psi_1\rangle + \lambda_2 A|\psi_2\rangle$$

(2) O produto de operadores lineares é um operador linear.

Se A e B são operadores lineares $\Rightarrow AB$ também é um operador linear.

O efeito do produto sobre um ket é definido por $(AB)|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle)$.

(3) Em geral $AB \neq BA$.

(4) Define-se comutador de A com B por $[A, B] = AB - BA$.

(5) Sejam $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ dois kets. Nós chamaremos de elemento de matriz de A entre $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$, o produto escalar $\langle\varphi|(A|\psi\rangle) =$ número $\begin{cases} \text{linear em } |\psi\rangle \\ \text{antilinear em } |\varphi\rangle \end{cases}$

(6) Até aqui $\begin{cases} |\psi\rangle \rightarrow \text{ vetor estado} \\ \langle\varphi| \rightarrow \text{ funcional linear} \end{cases}$ $\Rightarrow$ definimos também $\langle\varphi|\psi\rangle$ como um produto escalar $\Rightarrow$ Um número complexo, resultado da ação do funcional linear sobre o ket. O que seria a quantidade $|\psi\rangle\langle\varphi|$?

Formalismo de Dirac para a Mecânica Quântica

(7) Afirmamos que $|\psi\rangle\langle\varphi|$ é um operador.

Para verificar, atue esta quantidade sobre um ket e veja se produz outro ket. Considere $|\chi\rangle$, um ket arbitrário e aplique $|\psi\rangle\langle\varphi|$ sobre ele para obter $|\psi\rangle\langle\varphi|\chi\rangle$. Isso é um ket multiplicado por um número complexo.

O resultado de $|\psi\rangle\langle\varphi|$ sobre um ket é outro ket $\therefore$ $|\psi\rangle\langle\varphi|$ é um operador.

(8) Note que a ordem dos símbolos é de importância crítica (acabamos de ver que $\langle\varphi|\psi\rangle$ é um número complexo e que $|\psi\rangle\langle\varphi|$ é um operador). Só os números complexos tem uma certa liberdade.

$$\text{Para os números complexos vale} \begin{cases} |\psi\rangle\lambda = \lambda|\psi\rangle \\ \langle\psi|\lambda = \lambda\langle\psi| \\ A\lambda|\psi\rangle = \lambda A|\psi\rangle \\ \langle\varphi|\lambda|\psi\rangle = \lambda\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle\lambda \end{cases}$$

Note, entretanto, que para bras, kets e operadores, a ordem faz diferença!

Formalismo de Dirac para a Mecânica Quântica

- *O projetor* $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ *sobre o ket* $|\varphi\rangle$.

  Suponha $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Quanto vale $P_\psi|\varphi\rangle$ e o que significa?

  $P_\psi|\varphi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle$ e parece ser uma espécie de projeção de $|\varphi\rangle$ ao longo de $|\psi\rangle$.

- Quanto vale P_ψ^2?

  $$P_\psi^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi \begin{cases} \text{esperado, pois projetar duas vezes na mesma} \\ \text{direção é o mesmo que projetar uma vez só.} \end{cases}$$

- Projetor sobre um subespaço $\mathcal{E}_q$.

  Comece definindo o subespaço $\mathcal{E}_q$ por um conjunto de kets ortonormais,

  isto é $\begin{cases} |\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, ...|\varphi_q\rangle \\ \langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij} \end{cases} \Rightarrow$ e construa $P_q = \sum_{i=1}^{q} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$.

  Note que $P_q^2 = \sum_{ij} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle\langle\varphi_j| = \sum_{ij} |\varphi_i\rangle\delta_{ij}\langle\varphi_j| = \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| = P_q$.

  Note que $P_q|\psi\rangle = \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle \rightarrow$ projeção de $|\psi\rangle$ no espaço dos $|\varphi_i\rangle's$.

- Note que se o subespaço for completo, teremos apenas uma representação

  de $|\Psi\rangle$ dada por $|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{\text{completo}} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle \Rightarrow \mathbb{1} = \sum_{i=1}^{\text{completo}} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$.