A NOTAÇÃO DE DIRAC

AS CONSIDERAÇÕES SOBRE BASES NOS LEVAM À SEGUINTE VISÃO GERAL:

Base	Expansão	Componentes
$u_i(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i u_i(\mathbf{r})$	$c_i = (u_i, \psi)$
$v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3p\overline{\psi}(\mathbf{p})\, v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$	$\overline{\psi}(\mathbf{p}) = (v_{\mathbf{p}}, \psi)$
$\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3r_0\psi(\mathbf{r}_0)\, \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}_0) = (\xi_{\mathbf{r}_0}, \psi)$
$w_\alpha(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \int d\alpha c(\alpha)\, w_\alpha(\mathbf{r})$	$c(\alpha) = (w_\alpha, \psi)$
$\hat{\mathbf{e}}_i$	$\mathbf{A} = \sum_i a_i \hat{\mathbf{e}}_i$	$a_i = \hat{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{A}$

NOTE QUE NA ÚLTIMA LINHA, POR ANALOGIA, ESCREVEMOS UM VETOR E SUA EXPANSÃO EM UNITÁRIOS CARTESIANOS $(\hat{e}_1 = \hat{x}, \hat{e}_2 = \hat{y}, \hat{e}_3 = \hat{z})$.
AS 4 PRIMEIRAS LINHAS MOSTRAM QUE O MESMO ESTADO $\psi(\vec{r})$ PODE SER ESCRITO EM DIFERENTES BASES, ASSIM COMO UM VETOR $\vec{A}$ PODE SER DECOMPOSTO EM DIFERENTES TRÍADES, $\hat{e}_i$ OU $\hat{e}_i'$.
É CONCEITUALMENTE ÚTIL PENSAR NUM VETOR $\vec{A}$ COMO UM OBJETO MATEMÁTICO ABSTRATO, INDEPENDENTE DE SUA EXPANSÃO EM COMPONENTES.

DA MESMA FORMA, VAMOS ASSOCIAR AO ESTADO DE UMA PARTÍCULA UM ESTADO ABSTRATO QUE DENOTAREMOS: $|\psi\rangle$; ISSO É O QUE CHAMAMOS UM "KET", PERTENCENTE A UM ESPAÇO DE ESTADOS $\mathcal{E}$:

$$\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F} \longrightarrow |\psi\rangle \in \mathcal{E}$$

$\mathcal{E}$ É UM ESPAÇO VETORIAL, COMO $\mathcal{F}$.

NOTE QUE AGORA $\psi(\vec{r})$ É APENAS A COMPONENTE DE $|\psi\rangle$ NA BASE $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$, COMO PODE SER VISTO NA TABELA. ISSO FICARÁ MAIS CLARO ADIANTE.

O IMPORTANTE É QUE O ESTADO $|\psi\rangle$ É LIVRE DE UMA ESCOLHA DE BASE.

O PRODUTO ESCALAR DE DOIS ESTADOS $|\varphi\rangle$ E $|\psi\rangle$ SEGUE A DEFINIÇÃO USUAL:

$$\left(|\varphi\rangle, |\psi\rangle\right) = \int d^3r\, \varphi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})$$

$$= \sum_i b_i^* c_i$$

$$= \int b^*(\alpha)\, c(\alpha)\, d\alpha$$

• O ESPAÇO DUAL $\mathcal{E}^*$

O ESPAÇO DUAL A $\mathcal{E}$, DENOTADO $\mathcal{E}^*$, É O ESPAÇO VETORIAL DE FUNCIONAIS LINEARES DEFINIDOS EM $\mathcal{E}$.
UM FUNCIONAL LINEAR É UMA FUNÇÃO LINEAR QUE LEVA KETS $|\psi\rangle$ EM NÚMEROS COMPLEXOS:

$$|\psi\rangle \longrightarrow \chi(|\psi\rangle) \in \mathbb{C}$$

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

VAMOS DENOTAR OS FUNCIONAIS LINEARES POR UM "BRA": $\langle\chi|$

$$\chi(|\psi\rangle) = \langle\chi|\psi\rangle$$

A TERMINOLOGIA VEM DO INGLÊS "BRACKET" QUE FOI SEPARADO EM DUAS "PARTES":

$$\langle\chi| \quad \text{E} \quad |\psi\rangle$$

O PRODUTO ESCALAR "INDUZ" UMA ASSOCIAÇÃO DE UM BRA (UM FUNCIONAL LINEAR) A UM KET (UM ESTADO):

DADO $|\varphi\rangle \longrightarrow \langle\varphi|\psi\rangle = (|\varphi\rangle, |\psi\rangle)$

QUE É, DE FATO, UM FUNCIONAL LINEAR, A PARTIR DAS PROPRIEDADES DO PRODUTO ESCALAR. MAS NOTE QUE ESSA ASSOCIAÇÃO DE UM BRA A UM KET É ANTI-LINEAR. DADO:

$$\lambda_1|\varphi_1\rangle + \lambda_2|\varphi_2\rangle \rightarrow \langle\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2|\psi\rangle =$$

$$= (\lambda_1|\varphi_1\rangle + \lambda_2|\varphi_2\rangle, |\psi\rangle)$$

$$= \lambda_1^*(|\varphi_1\rangle, |\psi\rangle) + \lambda_2^*(|\varphi_2\rangle, |\psi\rangle) =$$

$$= \lambda_1^*\langle\varphi_1|\psi\rangle + \lambda_2\langle\varphi_2|\psi\rangle$$

OU: $\lambda_1|\varphi_1\rangle + \lambda_2|\varphi_2\rangle \rightarrow \lambda_1^*\langle\varphi_1| + \lambda_2^*\langle\varphi_2|$

ESSA ASSOCIAÇÃO NOS PERMITE ESCREVER, DE MANEIRA GERAL, O PRODUTO ESCALAR EM NOTAÇÃO DE DIRAC:

$$\left(|\varphi\rangle, |\psi\rangle\right) = \langle\varphi|\psi\rangle$$

E, AS PROPRIEDADES USUAIS FICAM ASSIM:

(i) $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*$

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

(iii) $\langle\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2|\psi\rangle = \lambda_1^*\langle\varphi_1|\psi\rangle + \lambda_2^*\langle\varphi_2|\psi\rangle$

(iv) $\langle\psi|\psi\rangle \in \mathbb{R}$ E POSITIVO OU ZERO

(v) $\langle\psi|\psi\rangle = 0$ SE E SOMENTE SE $|\psi\rangle = 0$

(vi) $\langle\varphi|\psi\rangle = 0 \Longrightarrow |\varphi\rangle$ E $|\psi\rangle$ SÃO DITOS ORTOGONAIS

EMBORA EXISTA UM BRA PARA TODO KET, A RECÍPROCA NÃO É VERDADEIRA. POR EXEMPLO, DADO $|\psi\rangle$, OS SEGUINTES FUNCIONAIS SÃO BEM DEFINIDOS:

$$\xi_{\vec{r}_0}(|\psi\rangle) = \int d^3r \; \xi^*_{\vec{r}_0}(\vec{r})\psi(\vec{r})$$

$$= \int d^3r \; \delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}_0)$$

$$v_{\vec{p}}(|\psi\rangle) = \int d^3r \; v^*_{\vec{p}}(\vec{r})\psi(\vec{r})$$

$$= \int \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}}\psi(\vec{r}) = \bar{\psi}(\vec{p})$$

MAS AS FUNÇÕES $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$ E $v_{\vec{p}}(\vec{r})$ NÃO PERTENCEM A $\mathcal{F}$ E, PORTANTO, NÃO SÃO KETS.

NO ENTANTO, É ÚTIL ESTENDER O ESPAÇO $\mathcal{F}$ PARA INCLUIR ESTADOS COMO $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$ E $v_{\vec{p}}(\vec{r})$ ("KETS GENERALIZADOS"), DE TAL FORMA QUE A RELAÇÃO ENTRE KETS E BRAS SEJA UM PARA UM, EMBORA $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$ E $v_{\vec{p}}(\vec{r})$ NÃO SEJAM ESTADOS FÍSICOS.

OPERADORES LINEARES

A ATUAÇÃO DE OPERADORES LINEARES SOBRE KETS SEGUE A DEFINIÇÃO ANTERIOR DA ATUAÇÃO SOBRE FUNÇÕES EM $\mathcal{F}$. ASSIM, UM OPERADOR LINEAR A LEVA KETS EM KETS:

$$|\psi\rangle \xrightarrow[A]{} |\psi'\rangle = A|\psi\rangle$$

LINEARIDADE: $A[\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle] = \lambda_1 A|\psi_1\rangle + \lambda_2 A|\psi_2\rangle$

PRODUTO DE A POR B:

$$AB|\psi\rangle = A[B|\psi\rangle]$$

COMUTADOR DE A E B: $[A,B] = AB - BA$

ELEMENTO DE MATRIZ DE A ENTRE OS KETS $|\varphi\rangle$ E $|\psi\rangle$:

$$\boxed{\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\varphi|\,[A|\psi\rangle]}$$

- UM KET SEGUIDO DE UM BRA, APLICADOS NESSA ORDEM, DEFINEM UM OPERADOR:

$$A = |\varphi\rangle\langle\psi|$$

$$\Rightarrow A|\chi\rangle = |\varphi\rangle\langle\psi|\chi\rangle = \underbrace{(\langle\psi|\chi\rangle)}_{\in\mathbb{C}}|\varphi\rangle$$

NOTE QUE A ORDEM É FUNDAMENTAL:

$$|\varphi\rangle\langle\psi| \neq |\psi\rangle\langle\varphi|$$

- PROJETOR NO KET $|\psi\rangle$:

SUPONHA QUE $|\psi\rangle$ É NORMALIZADO A UM:

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1$$

O PROJETOR NO ESTADO $|\psi\rangle$ É:

$$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$$

TAL QUE:

$$P_\psi|\varphi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle = (\langle\psi|\varphi\rangle)|\psi\rangle$$

É PROPORCIONAL A $|\psi\rangle$ E O COEFICIENTE É O PRODUTO ESCALAR $\langle\psi|\varphi\rangle$, QUE É COMPATÍVEL COM NOSSA INTUIÇÃO SOBRE A PROJEÇÃO EM $|\psi\rangle$ DE UM VETOR $|\varphi\rangle$

PROPRIEDADES DE PROJETORES:

$$P_\psi^2 = P_\psi$$

DE FATO,

$$P_\psi^2 = |\psi\rangle \underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{1} \langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi$$

MAIS ADIANTE, PROVAREMOS OUTRA PROPRIEDADE IMPORTANTE DOS PROJETORES

. PROJETORES EM UM SUB-ESPAÇO

SEJAM $|\varphi_i\rangle$ $(i = 1, 2, \ldots, N)$ UM CONJUNTO DE KETS ORTONORMAIS:

$$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$$

ESSES KETS GERAM UM SUB-ESPAÇO DE $\mathcal{E}$ (COMBINAÇÕES LINEARES DE $|\varphi_i\rangle$). O PROJETOR NESSE SUB-ESPAÇO É:

$$P_N = \sum_{i=1}^{N} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

NOTE QUE:

$$P_N^2 = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} |\varphi_i\rangle \underbrace{\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle}_{\delta_{ij}} \langle\varphi_j|$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \delta_{ij} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j|$$

$$= \sum_{i=1}^{N} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| = P_N$$

A ATUAÇÃO DE P_N DE FATO "PROJETA" NO SUB-ESPAÇO:

$$P_N |\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} |\varphi_i\rangle \underbrace{\langle\varphi_i|\psi\rangle}_{\equiv C_i} = \sum_{i=1}^{N} C_i |\varphi_i\rangle$$

- ATUAÇÃO DE OPERADORES EM BRAS

ASSIM COMO UM OPERADOR LINEAR ATUA "PRA FRENTE" EM UM KET:

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

ELE TAMBÉM PODE ATUAR "PRA TRÁS" EM UM BRA. O QUE É $\langle\psi|A = ?$

TOMAMOS, POR CONSISTÊNCIA INTERNA, $\langle\psi|A$ COMO SENDO UM BRA (FUNCIONAL LINEAR) $\langle\chi|$ TAL QUE:

$$\left(\langle\psi|A\right)|\varphi\rangle = \langle\psi|\left(A|\varphi\rangle\right)$$

PARA TODO $|\varphi\rangle$ E $|\psi\rangle$

ASSIM, PODEMOS ESCREVER SEM PARÊNTESES:

$$\left(\langle\psi|A\right)|\varphi\rangle = \langle\psi|\left(A|\varphi\rangle\right) = \langle\psi|A|\varphi\rangle$$

O CONJUGADO HERMITIANO DE UM OPERADOR

O CONJUGADO HERMITIANO, OU ADJUNTO, DE UM OPERADOR A, DENOTADO COMO $A^\dagger$ É DEFINIDO PELA SEU ELEMENTO DE MATRIZ:

$$\langle \varphi | A^\dagger | \psi \rangle = \left(\langle \psi | A | \varphi \rangle \right)^*$$

PARA TODOS $|\varphi\rangle$ E $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$. É IMPORTANTE NOTAR QUE UM OPERADOR É COMPLETAMENTE BEM DEFINIDO PELOS VALORES DE <u>TODOS</u> OS SEUS ELEMENTOS DE MATRIZ ENTRE QUAISQUER ESTADOS DE $\mathcal{E}$.

DA DEFINIÇÃO:

$$\langle \varphi | A^{+} | \psi \rangle = \left(\langle \psi | A | \varphi \rangle \right)^{*}$$

SE ESCREVERMOS $|\chi\rangle = A|\varphi\rangle$ TEMOS

$$\langle \varphi | A^{+} | \psi \rangle = \left(\langle \psi | \chi \rangle \right)^{*} = \langle \chi | \psi \rangle$$

$\Rightarrow \langle \varphi | A^{+} = \langle \chi |$ JÁ QUE $|\psi\rangle$ É QUALQUER.

ASSIM, DA ASSOCIAÇÃO KET $\rightleftarrows$ BRA:

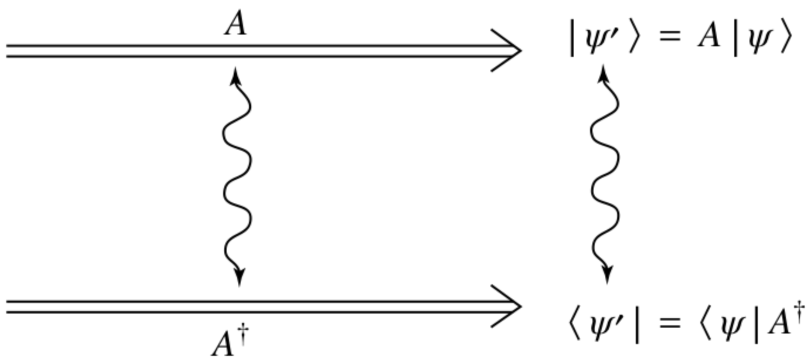
$$|\chi\rangle = A|\varphi\rangle \rightleftarrows \langle \varphi | A^{+} = \langle \chi |$$

VEMOS QUE O BRA CORRESPONDENTE AO KET $A|\varphi\rangle$ É $\langle \varphi | A^{+}$

É CONVENIENTE DIZER QUE $\langle \varphi | A^{+}$ É O CONJUGADO HERMITIANO DE $A|\varphi\rangle$ OU:

$$\left(A|\varphi\rangle \right)^{+} = \langle \varphi | A^{+}$$

NOTE A MUDANÇA DE ORDEM.


A
$|\,\psi'\,\rangle = A\,|\,\psi\,\rangle$
$A^\dagger$
$\langle\,\psi'\,| = \langle\,\psi\,|\,A^\dagger$

PROPRIEDADES IMPORTANTES DO ADJUNTO

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

(ii) $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ (NOTE A MUDANÇA DE ORDEM)

(iii) $(\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger$

(iv) $(A+B)^\dagger = (A^\dagger + B^\dagger)$

PROVAS:

(i) SEJA $|\psi\rangle = (A^\dagger)^\dagger |\varphi\rangle$. ENTÃO, $\langle\psi| = \langle\varphi| A^\dagger$. MAS ISSO IMPLICA QUE $|\psi\rangle = A|\varphi\rangle$. COMPARANDO, OBTEMOS $(A^\dagger)^\dagger = A$

(ii) SEJA $|\psi\rangle = (AB)^\dagger |\varphi\rangle \Rightarrow \langle\psi| = \langle\varphi| AB$.
DEFINA $|\chi\rangle = A^\dagger|\varphi\rangle \Rightarrow \langle\chi| = \langle\varphi| A \Rightarrow$

$\Rightarrow \langle\psi| = \langle\chi| B \Rightarrow |\psi\rangle = B^\dagger|\chi\rangle = B^\dagger(\langle\chi|)^\dagger =$

$= B^\dagger A^\dagger |\varphi\rangle$. COMPARANDO: $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$.

AS OUTRAS FICAM COMO EXERCÍCIO.

EXEMPLO: SEJA O OPERADOR $D_x = \frac{\partial}{\partial x}$.

TOME UM ELEMENTO DE MATRIZ QUALQUER:

$$\langle \varphi | D_x | \psi \rangle = \int d^3r \, \varphi^*(\vec{r}) \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial x} = \int dx\,dy\,dz \, \varphi^*(\vec{r}) \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial x}$$

INTEGRANDO POR PARTES:

$$= \int dy\,dz \left[\varphi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \Big|_{x \to -\infty}^{x \to \infty} - \int dx \, \psi(\vec{r}) \frac{\partial \varphi^*(\vec{r})}{\partial x} \right]$$

$$= - \int dx\,dy\,dz \, \psi(\vec{r}) \frac{\partial \varphi^*(\vec{r})}{\partial x} = - \left[\int d^3r \, \psi^*(\vec{r}) \frac{\partial \varphi(\vec{r})}{\partial x} \right]^*$$

$$= \left[\langle \psi | (-D_x) | \varphi \rangle \right]^* \Rightarrow \boxed{D_x^\dagger = - D_x}$$

DA PROPRIEDADE (iii)

$$P_x^\dagger = \left(\frac{\hbar}{i} D_x\right)^\dagger = \left(-\frac{\hbar}{i}\right) D_x^\dagger = \frac{\hbar}{i} D_x = P_x$$

ANALOGAMENTE:

$$\langle \varphi | X | \psi \rangle = \int d^3r\, \varphi^*(\vec{r})(x)\psi(\vec{r}) = \left[\int d^3r\, \psi^*(\vec{r})(x)\varphi(\vec{r})\right]^*$$

$$= \left[\langle \psi | X | \varphi \rangle\right]^* \Rightarrow X^\dagger = X$$

SEGUE PELOS MESMOS ARGUMENTOS QUE:

$$P_y^\dagger = P_y \quad ; \quad P_z^\dagger = P_z$$

$$Y^\dagger = Y \quad ; \quad Z^* = Z$$

UM OPERADOR QUE É IGUAL AO SEU ADJUNTO É CHAMADO DE AUTO-ADJUNTO OU HERMITIANO. NESSE CASO:

$$\langle \psi | A | \varphi \rangle = \left(\langle \varphi | A | \psi \rangle\right)^\dagger$$

COMO TOMAR O HERMITIANO CONJUGADO DE SEQUÊNCIAS DE KETS, BRAS, OPERADORES

- DADO O OPERADOR $B = |\psi\rangle\langle\varphi|$, SEU HERMITIANO CONJUGADO É:

$$B^\dagger = |\varphi\rangle\langle\psi|$$

NOTE A MUDANÇA DE ORDEM

- UM PROJETOR É SEMPRE HERMITIANO

$$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| \quad ; \quad P_\psi^\dagger = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi$$

- DE MANEIRA GERAL, TOMAR O HERMITIANO CONJUGADO ENVOLVE:
  - $\lambda \to \lambda^*$
  - $|\psi\rangle \to \langle\psi|$
  - $A \to A^\dagger$
  - INVERTER A ORDEM

EXEMPLO:

$$\lambda \langle u|A|v\rangle |w\rangle\langle\psi| \to |\psi\rangle\langle w| \langle v|A^\dagger|u\rangle \lambda^* =$$
$$= \lambda^* \langle v|A^\dagger|u\rangle |\psi\rangle\langle w|$$