§ Espaços de Bras e Kets

Nessa discussão prévia (puramente heurística), apontou para a necessidade de introduzir espaços vetoriais complexos na descrição dos fenômenos quânticos. Nesta descrição, usaremos uma forma compacta da Álgebra linear desenvolvida por Dirac.

A dimensão do espaço em questão depende da natureza física do sistema sob estudo. No caso da experiência de Stern-Gerlach, os únicos graus de liberdade de interesse são as correspondentes ao spin do átomo (ou do elétron da última camada). A dimensionalidade é determinada pelo número de trajetórias alternativas que os átomos podem seguir na experiência (duas possibilidades para spin $\frac{\hbar}{2}$). No caso geral, o espaço vetorial pode ter dimensão infinita numerável ou não numerável (contínuo). Chamaremos genericamente estes espaços de espaços de Hilbert (a definição precisa de um espaço de Hilbert será dada mais adiante).

Um estado físico é representado em MQ por um vetor estado em um espaço vetorial complexo.

▶ Notação de Dirac: chamamos tal vetor de ket e o representamos por

$$|\alpha\rangle$$

"Redundant *truth* doesn't bother us"

R. Feynman

(The Feynman Lectures on Physics, Vol. III)

Postulado: postulamos que este ket $|\alpha\rangle$ contém informação completa sobre o sistema físico que representa.

Em um espaço vetorial, dois kets podem ser somados:

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle.$$

Superposição de Estados

O resultado é outro ket $|\gamma\rangle$. Podemos também multiplicar por coeficientes complexos, $c \in \mathbb{C}$

$$c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c.$$

Em particular, para $c \equiv 0$, $c|\alpha\rangle = 0$, o ket nulo.

Postulado: $|\alpha\rangle$ e $c|\alpha\rangle$, com $c \neq 0$, representam o mesmo estado físico.

Isto é importa apenas a direção e não o valor absoluto do vetor (representação de raios).

Def: Observável

Observáveis físicos, como o momentum e o spin, são representados por operadores lineares neste espaço vetorial. Digamos que A é um tal operador. Tal operador atua sobre um ket pela esquerda:

$$A(|\alpha\rangle) = A|\alpha\rangle$$

Neste contexto, o símbolo $\cancel{|\alpha\rangle A}$ não tem sentido.

Def: <u>Autokets do operador A</u>

Chamamos auto-kets do operador A, os kets $|a'\rangle, |a''\rangle, \ldots$ com a propriedade:

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle = |a'\rangle a',$$
$$A|a''\rangle = a''|a''\rangle = |a''\rangle a'', \ldots$$

onde $(a', a'', a''', \ldots)$ são números. O conjunto de todos os $(a', a'', a''', \ldots) = \{a'\}$ com esta propriedade é chamado de conjunto dos <u>autovalores</u> de A.

Def. – Um estado físico correspondente à um auto-ket de A é chamado de <u>auto-estado</u>

<u>Exemplo</u>. Seja o caso de spin $\hbar/2$. Os estados $|S_z;+\rangle$ e $|S_z;-\rangle$ são autoestados do operador S_z

$$S_z|S_z;+\rangle = \frac{\hbar}{2}|S_z;+\rangle,$$

$$S_z|S_z;-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|S_z;-\rangle,$$

com autovalores $\left(\frac{\hbar}{2}, -\frac{\hbar}{2}\right)$

Em um espaço de dimensão N, os N auto-kets do operador A formam uma base. Desta maneira, qualquer ket do espaço pode ser desenvolvido em uma combinação linear do tipo:

$$|\alpha\rangle = \sum_{\{a'\}} c_{a'} |a'\rangle ,$$

com $(a', a'', \ldots, a^{(N)})$ sendos os autovalores de A, e os $c_{a'}$ são coeficientes complexos.

§ O espaço dual dos Bras e productos escalares

Definimos agora um espaço vetorial correspondente aos vetores bras, como sendo o espaço dual do espaço dos kets.

$\langle \quad | \quad \rangle$ é um número complexo

bra-c-ket

Postulamos que para todo ket $|\alpha\rangle$ existe um bra, $\langle\alpha|$, no espaço dual. O espaço dual é gerado por um conjunto de auto-bras $\{\langle a'|\}$. Temos a correspondência biunívoca seguinte:

$$|\alpha\rangle \overset{DC}{\longleftrightarrow} \langle\alpha|$$

$$|a'\rangle, |a''\rangle, \ldots \overset{DC}{\longleftrightarrow} \langle a'|, \langle a''|, \ldots$$

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle \overset{DC}{\longleftrightarrow} \langle\alpha| + \langle\beta| = \langle\gamma|$$

DC: correspondência do dual

Postulamos: $\quad c|\alpha\rangle \overset{DC}{\longleftrightarrow} \langle\alpha|c^* = c^*\langle\alpha|$,
com $c \in \mathbb{C}$

De maneira mais geral:

$$c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle \overset{DC}{\longleftrightarrow} c_\alpha^*\langle\alpha| + c_\beta^*\langle\beta|$$

Def: Produto interno (escalar)

O espaço dual pode ser pensado como o espaço de todas os funcionais lineares sobre o espaço dos kets. Uma funcional importante é o chamado produto interno ou escalar. Seja $\mathcal{H}$ o espaço de Hilbert dos kets, e $\mathcal{H}^*$ o correspondente espaço dual:

$$\langle\beta| : \mathcal{H} \longrightarrow \mathbb{C} \quad , \quad \langle\beta| \in \mathcal{H}^*$$

Com a notação de Dirac, representamos a ação de $\langle\beta|$ sobre um ket de maneira compacta:

$$\mathbb{C} \ni \langle\beta|(|\alpha\rangle) \equiv \langle\beta|\alpha\rangle .$$

Postulamos a propriedade:

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^* \in \mathbb{C} .$$

Esta propriedade define a chamada Métrica Hermiteana.
Temos:

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\alpha|\alpha\rangle^* \Rightarrow \langle\alpha|\alpha\rangle \text{ é real}$$

▸ Postulado:

$$\boxed{\langle\alpha|\alpha\rangle \geqslant 0 ,}$$

onde a igualdade só é valida para o ket nulo. Este postulado é chamado da métrica definida positiva. Este postulado é essencial para a interpretação estatística (em termo de probabilidades) da Mecânica Quântica.

▸ Def: Ortogonalidade

Dois kets $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ são ortogonais se

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle = 0$$

Dado um ket $|\alpha\rangle$ arbitrário não nulo, ele sempre pode ser normalizado $\longrightarrow |\tilde{\alpha}\rangle$

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}}\,|\alpha\rangle,$$

de maneira que
$$\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\alpha}\rangle = 1$$

▶ Def: Norma
$$\|\,|\alpha\rangle\| \equiv \sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle} \geq 0$$

A norma é nula só para o ket nulo. Como $|\alpha\rangle$ e $c|\alpha\rangle$ representam o mesmo estado físico, sempre podemos representar um estado por um ket normalizado.

§ Operadores : $X, Y, \ldots \quad : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$

$$X(|\alpha\rangle) = X|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$$

Dois operadores X e Y são iguais, $X = Y$, se

$$X|\alpha\rangle = Y|\alpha\rangle,$$

para um ket arbitrário $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$. O operador nulo satisfaz
$$X|\alpha\rangle = 0, \quad \forall\, |\alpha\rangle \in \mathcal{H}$$

Aqui trabalhamos com operadores lineares:

$$\text{i)} \quad X + Y = Y + X \,,$$
$$\text{ii)} \quad X + (Y + Z) = (X + Y) + Z = X + Y + Z \,,$$
$$\text{iii)} \quad X(c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle) = c_\alpha X|\alpha\rangle + c_\beta X|\beta\rangle,$$
$$c_\alpha, c_\beta \in \mathbb{C}$$

No espaço dos <u>bras</u>, um operador sempre age pela direita:

$$(\langle\alpha|)X = \langle\alpha|X \,.$$

Outra vez, o símbolo $\cancel{X\langle\alpha|}$ não tem sentido. Em geral, $X|\alpha\rangle$ e $\langle\alpha|X$ não são duais um do outro. A correspondência dual define um outro operador $X^\dagger$, chamado <u>Hermiteano adjunto</u> (hermiteano conjugado), de maneira que:

$$X|\alpha\rangle \xleftrightarrow{DC} \langle\alpha|X^\dagger$$

<u>Def</u>: <u>Operador Hermiteano</u>

$$X^\dagger = X$$

§ <u>Multiplicação (composição) de operadores</u>

$$XY \neq YX$$

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

Com

$$X(YZ) = (XY)Z = XYZ$$

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

Notar que:

$$(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$$

$$XY|\alpha\rangle = X(Y|\alpha\rangle) \overset{DC}{\longleftrightarrow} (\langle\alpha|Y^\dagger)X^\dagger = \langle\alpha|Y^\dagger X^\dagger$$

§ Produto Externo

$$(|\beta\rangle)(\langle\alpha|) \equiv |\beta\rangle\langle\alpha|$$

é a deve ser considerado como um operador

$$|\beta\rangle\langle\alpha| : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$$

$$\underbrace{(|\beta\rangle\langle\alpha|)}_{\text{operador}}\ \underbrace{(|\gamma\rangle)}_{\text{ket}} \equiv \underbrace{|\beta\rangle}_{\text{ket}}\ \underbrace{\langle\alpha|\gamma\rangle}_{\text{número C}} = \langle\alpha|\gamma\rangle\,|\beta\rangle$$

Seja $X = |\beta\rangle\langle\alpha|$, o que é $X^\dagger$?

$$X|\gamma\rangle = |\beta\rangle\langle\alpha|\gamma\rangle \overset{DC}{\longleftrightarrow} \langle\alpha|\gamma\rangle^* \langle\beta|$$

$$= \langle\gamma|\alpha\rangle\langle\beta| = \langle\gamma|X^\dagger \Rightarrow X^\dagger = |\alpha\rangle\langle\beta|$$

§ Axioma da Associatividade

$$\boxed{(\underbrace{\langle\beta|}_{\text{bra}})\cdot(X\underbrace{|\alpha\rangle}_{\text{ket}}) = (\underbrace{\langle\beta|X}_{\text{bra}})\cdot(\underbrace{|\alpha\rangle}_{\text{ket}})}$$

Escrevemos de maneira compacta simplesmente

$$\langle\beta|X|\alpha\rangle.$$

A associatividade é postulada de maneira completamente geral, entanto usamos expressões permitidas como a de cima. Temos:

$$\langle\beta|X|\alpha\rangle = \langle\beta|\cdot(X|\alpha\rangle) = \{(\langle\alpha|X^{+})|\beta\rangle\}^{*}$$

$$= \langle\alpha|X^{+}|\beta\rangle^{*}.$$

Para um operador Hermiteano, temos:

$$\langle\beta|X|\alpha\rangle = \langle\alpha|X|\beta\rangle^{*}$$

Seja $\mathcal{V}$ o espaço vetorial dos 'kets':

$$|\alpha\rangle \in \mathcal{V} \quad , \text{ para todo } |\alpha\rangle .$$

Seja $\mathcal{V}^*$ o espaço dual de $\mathcal{V}$. $\mathcal{V}^*$ é o espaço de todas as funcionais lineares sobre $\mathcal{V}$:

$$\beta \in \mathcal{V}^* , \quad \beta : \mathcal{V} \longrightarrow \mathbb{C} ,$$

ou seja $\beta(|\alpha\rangle) = c_{\beta\alpha} \in \mathbb{C}$, é um complexo.

As aplicações $\{\beta\}$ e $\mathcal{V}^*$ são lineares:

$$\beta(a_1 |\alpha_1\rangle + a_2 |\alpha_2\rangle) =$$

$$= a_1 \beta(|\alpha_1\rangle) + a_2 \beta(|\alpha_2\rangle) .$$

- **Notação de Dirac** :

Escrever o escalar $\beta(|\alpha\rangle) = c_{\beta\alpha} \in \mathbb{C}$ na forma:

$$\beta(|\alpha\rangle) \equiv \langle\beta|\alpha\rangle ,$$

ou seja escrevemos os vetores do espaço dual como

$$\langle\beta| \in \mathcal{V}^*$$

Dirac deu o nome de 'bra' aos $\{\langle\beta|\}$ de ϑ^*, com a 'engenhoca'

$$\langle \ldots | \ldots \rangle$$

formando a palavra

bra - c - ket

A união de um 'bra' e um 'ket' (produto escalar) fornece um escalar.

O espaço dual ϑ^* tem a mesma dimensão que ϑ e podemos construir uma correspondência bijetora

$$|\alpha\rangle \xleftrightarrow{DC} \langle\alpha| \quad ,$$

entre 'bras' e 'kets'.

Postulamos uma métrica de caráter hermiteana

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$$

Antilinearidade : $b_1, b_2 \in \mathbb{C}$

$$\langle (b_1\beta_1 + b_2\beta_2) | \alpha \rangle = \langle \alpha | b_1\beta_1 + b_2\beta_2 \rangle^*$$

linearidade das funcionais lineares:

$$\langle \alpha | b_1 \beta_1 + b_2 \beta_2 \rangle = b_1 \langle \alpha | \beta_1 \rangle + b_2 \langle \alpha | \beta_2 \rangle$$

Então:

$$\langle \alpha | b_1 \beta_1 + b_2 \beta_2 \rangle^* = b_1^* \langle \alpha | \beta_1 \rangle^* + b_2^* \langle \alpha | \beta_2 \rangle^*$$

$$= b_1^* \langle \beta_1 | \alpha \rangle + b_2^* \langle \beta_2 | \alpha \rangle$$

Resultado:

$$\langle (b_1 \beta_1 + b_2 \beta_2) | \alpha \rangle = b_1^* \langle \beta_1 | \alpha \rangle + b_2^* \langle \beta_2 | \alpha \rangle$$

$\langle \ldots | \ldots \rangle$ é linear em relação ao 2do. argumento e anti-linear em relacão ao 1º