Notas de aula de Física Matemática I

Prof. Davi C. Rodrigues

Departamento de Física

Universidade Federal do Espírito Santo

2024/1

Sumário

CAPÍTULO 1

Introdução

1.1 Orientações gerais

- **Estas notas de aula visam auxiliar o acompanhamento da disciplina pelos alunos.**
- **Estas notas de aula não devem ser utilizadas em substituição a outras fontes, são complementares.**
- **Estas notas não incluem tudo o que foi dado em sala de aula.**
- **Ao encontrarem erros, me avisem por favor.**

1.2 Algumas notações

Algumas das notações usadas de forma repetida no texto são apresentadas aqui de forma resumida.

- V é comumente usado para designar um espaço vetorial arbitrário.
- $\mathbb{F}$ designa o corpo do espaço vetorial (é real ou complexo).
- $\equiv$ denota igualdade por definição. Ou seja, ao encontrar a expressão $A \equiv B$ não se preocupe em descobrir que argumento foi usado para encontrar a relação entre A e B, pois a relação é uma definição.
- $\{\quad\}$ é usado para denotar um conjunto (não-ordenado) de elementos. Ou seja, a ordem dos elementos não é relevante, $\{a, b\} = \{b, a\}$. Um conjunto indexado por i é denotado por $\{a_i\}_{i=1}^{N} \equiv \{a_1, a_2, ..., a_N\}$.
- $|a\rangle$: denota um elemento de um espaço vetorial de qualquer natureza. Essa notação "$|a\rangle$" tem o nome de ket.
- $\langle a|b\rangle \equiv g(|a\rangle, |b\rangle)$ é o produto interno entre $|a\rangle$ e $|b\rangle$.
- $\langle a| \equiv g(|a\rangle, \;)$: é o bra associado ao ket $|a\rangle$. O bra é um funcional linear $\langle a| : V \to \mathbb{F}$.
- $\mathbb{R}^n$: Espaço formado por n números reais ordenados em sequência.
  Elemento geral: $(a_1, a_2, ..., a_n)$, com $a_i \in \mathbb{R}$.
- $\mathbb{C}^n$: Espaço formado por n números complexos ordenados em sequência.
  Elemento geral: $(a_1, a_2, ..., a_n)$, com $a_i \in \mathbb{C}$.
- $M_{n\times m}$: espaço das matrizes reais ou complexas de dimensão $n \times m$. O produto interno natural desse espaço é o produto entre matrizes.
  Elemento geral de $M_{2\times 1}$: $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$. Elemento geral de $M_{1\times 2}$: $\begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix}$.

- $\mathbb{E}^n$: Espaço Euclideano de dimensão n. Representamos elementos deste espaço por objetos geométricos na forma de setas. O produto interno é o produto escalar.
  Elemento geral em $\mathbb{E}^3$: $\vec{A} = A_x\hat{\imath} + A_y\hat{\jmath} + A_z\hat{k}$.

- $C^n(a,b)$: Espaço de funções, reais ou complexas, de classe C^n com domínio dado pelo intervalo real (a,b). Ou seja, são funções que são diferenciáveis n vezes e sua enésima derivada é contínua. Consequentemente, $C^0(a,b)$ é o espaço de funções contínuas com domínio em (a,b).

- $\vec{A}$: denota um elemento de $\mathbb{E}^n$.

Parte I

Álgebra linear e espaços de Hilbert

CAPÍTULO 2

Espaços vetoriais

Neste curso usaremos com frequência a notação de bra e ket, introduzida por Paul Dirac. É notação comumente usado no contexto de mecânica quântica, mas cuja utilidade e aplicação são consideravelmente mais amplas. Atualmente, há vários livros de física matemática que adotam essa notação.

Vetores no espaço euclideano, por exemplo em $\mathbb{E}^3$, são comumente denotados por $\vec{A}$ ou $\mathbf{A}$. Vamos reservar usar a notação da "setinha" ($\vec{A}$) para vetores nesse espaço, mas em espaços vetoriais mais gerais, designaremos vetores por um ket, como em: $|A\rangle$.

2.1 Espaços e subespaços vetoriais

Definição 2.1: Espaço vetorial de corpo real

Sejam $|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle \in V$ e sejam $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. V é espaço vetorial se satisfizer:

1. **Soma.** Existe em V operação chamada de soma tal que:
   (a) $|a\rangle + |b\rangle \in V$,
   (b) $|a\rangle + |b\rangle = |b\rangle + |a\rangle$,
   (c) $(|a\rangle + |b\rangle) + |c\rangle = |a\rangle + (|b\rangle + |c\rangle)$.
2. **Elemento nulo.** Existe $|0\rangle \in V$ tal que $|a\rangle + |0\rangle = |a\rangle$.
3. **Inversa.** Para todo $|a\rangle \in V$ existe $|-a\rangle \in V$ tal que $|a\rangle + |-a\rangle = |0\rangle$.
4. **Produto entre vetores e números.**
   (a) $1|a\rangle = |a\rangle$,
   (b) $\alpha|a\rangle \in V$,
   (c) $(\alpha\beta)|a\rangle = \alpha(\beta|a\rangle)$,
   (d) $\alpha(|a\rangle + |b\rangle) = \alpha|a\rangle + \alpha|b\rangle$.

É conveniente e comum introduzir a notação $|-a\rangle \equiv -|a\rangle$. Essa notação implicitamente define a operação de subtração entre vetores.

No nome da definição anterior, usamos o termo "corpo real". Corpo real se refere ao espaço das constantes α, β na definição anterior, logo mais veremos o caso de corpo complexo. Em inglês, não se usa "*body*" nesse contexto, o termo é "*field*".

Problema 2.1

Verifique diretamente que $\mathbb{R}^n$, cujo elemento geral é denotado por $|a\rangle = (a_1, a_2, ..., a_n)$, constitui um espaço vetorial.

Problema 2.2

Verifique diretamente que $\mathbb{E}^n$, cujo elemento geral é denotado por $|a\rangle = \vec{a} = a_1\hat{e}_1 + a_2\hat{e}_2 + ... + a_n\hat{e}_n$, constitui um espaço vetorial.

Problema 2.3

Considere o espaço de todas as funções $\mathcal{C}^0(-\infty, \infty)$ (i.e., funções contínuas de domínio ilimitado) e cuja imagem está limitada entre 0 e 1; i.e., $\forall f \in \mathcal{C}^0, f : (-\infty, \infty) \to (0, 1)$. Este é um espaço vetorial?

Problema 2.4

Considere o espaço de todas as funções $\mathcal{C}^0(0, 1)$. Este é um espaço vetorial?

Problema 2.5

Verifique que o espaço das matrizes reais $n \times m$ constitui um espaço vetorial (considerando a soma usual de matrizes e a multiplicação usual entre uma matriz e um número).

Um número $z \in \mathbb{C}$ pode ser expresso pela combinação linear de 1 e a unidade imaginária i: $z = a + \mathrm{i}b$. Há semelhança entre essa estrutura de $\mathbb{C}$ com a de $\mathbb{R}^2$, no sentido de depender de um par ordenado de números reais. É imediato verificar que $\mathbb{C}^n$ pode ser visto como um espaço vetorial de corpo real. Por outro lado, em $\mathbb{C}^n$, é desejável a possibilidade de multiplicação por números $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$. Isto nos leva à definição de um espaço vetorial de corpo complexo.

Definição 2.2: Espaço vetorial de corpo complexo

Ver definição 2.1, mas considerar $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$.

Muitos livros usam $\mathbb{F}$ para simbolizar o espaço do corpo do espaço vetorial, que é um espaço que pode ser ou real ou complexo. Assim, de forma compacta, a definição de espaço vetorial é muitas vezes apresentada de uma vez, para ambos os casos, usando $\mathbb{F}$. Em inglês, usa-se "field" no lugar de "corpo", por isso usa-se $\mathbb{F}$.

Problema 2.6

Verifique que $\mathbb{C}$ pode ser visto como um espaço vetorial de corpo real ou complexo, mas $\mathbb{R}$ não pode ser visto como espaço vetorial de corpo complexo.

Definição 2.3: Subespaço vetorial

Um espaço W é dito ser subespaço de um espaço vetorial V se:

1. W é não vazio,
2. todo elemento de W corresponde a um elemento de V,
3. qualquer combinação linear de elementos de W é elemento de W.

Problema 2.7

Verifique que, se W é um subespaço vetorial, então ele é também um espaço vetorial.

Problema 2.8

Mostre que o espaço formado pela interseção de dois subespaços vetoriais W_1 e W_2 é também um subespaço vetorial de V.

Problema 2.9

Sendo $\mathcal{P}_m[\mathrm{x}]$ o espaço vetorial de todos os polinômios de x de grau menor ou igual a m. Mostre que $\mathcal{P}_n[\mathrm{x}]$, com $n < m$, é subespaço vetorial de $\mathcal{P}_m[\mathrm{x}]$.

2.2 Independência linear

O conjunto de vetores $|a_1\rangle$, $|a_2\rangle$, $|a_3\rangle$... $|a_n\rangle$ pode ser denotado por $\{|a_i\rangle\}$ ou, de forma mais específica, $\{|a_i\rangle\}_{i=1}^{n}$.

Definição 2.4: Vetores linearmente independentes (LI)

Os vetores $\{|a_i\rangle\}_{i=1}^{n}$ são ditos linearmente independentes (LI) se

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i |a_i\rangle = 0 \implies \alpha_i = 0.$$

Por exemplo, no espaço euclideano, o vetores $\hat{\imath}$ e $\hat{\jmath}$ são LI, pois $k_x\hat{\imath} + k_y\hat{\jmath} = 0$ só pode ser verdade se $k_x = k_y = 0$. Os vetores $\vec{m} = (\hat{\imath} + \hat{\jmath})$ e $\vec{n} = 3(\hat{\imath} + \hat{\jmath})$ não são LI. Os vetores $\vec{p} = (\hat{\imath} + \hat{\jmath})$ e $\vec{q} = (\hat{\imath} - \hat{\jmath})$ são LI.

2.3 Base de espaço vetorial

Seja $\{|a_i\rangle\}$ um conjunto de vetores de um espaço vetorial V. O conjunto de todas as combinações lineares dos vetores $\{|a_i\rangle\}$ ***gera*** um subespaço vetorial de V, que denotamos por V_A.

Problema 2.10

a) Apresente dois possíveis exemplos para V, V_A e $\{|a_i\rangle\}$.

b) Demonstre, de forma geral, que V_A é necessariamente um subespaço vetorial de V.

Definição 2.5: Base e dimensão de espaço vetorial

Seja $\{|a_i\rangle\}$ um conjunto de vetores que gera um espaço vetorial V. Se $\{|a_i\rangle\}$ for LI, então $\{|a_i\rangle\}$ é dito ser base de V. Se $\{|a_i\rangle\}$ for base de V e tiver $N \in \mathbb{N}$ elementos, então diz-se que a dimensão de V é N (i.e., $\dim V = N$). Se a base tiver infinitos elementos, a dimensão de V é infinita (i.e., $\dim V = \infty$).

Para saber a dimensão de um espaço vetorial, não precisamos antes especificar uma base. Pode-se mostrar que, para bases finitas, o número de elementos da base é sempre o mesmo, independentemente da base escolhida.

Os espaços $\mathbb{R}^n$, $\mathbb{E}^n$ e $\mathcal{M}_{2,2}$ (espaço das matrizes reais 2×2) possuem respectivamente dimensão n, n e 4. O espaço $\mathbb{C}^n$, se estudado com corpo complexo (como é usual), tem dimensão n. Mas, usando corpo real, tem dimensão $2n$.

Problema 2.11

a) Apresente explicitamente uma base para o espaço vetorial formato pelas matrizes 3×3 reais e simétricas, e encontre a dimensão desse espaço.

b) Demonstre a afirmativa anterior sobre $\mathbb{C}^n$ e sua dimensão depender do corpo usado.

CAPÍTULO 3

Produto interno

3.1 Introdução

Comumente, os espaços vetoriais de interesse em física não são os espaços vetoriais mais gerais e simples possíveis possíveis, eles contém estruturas adicionais. Isto é válido para os vetores no $\mathbb{E}^3$ e também no contexto de Mecânica Quântica, onde o espaço relevante é o espaço de Hilbert (sobre o qual veremos mais tarde).

No $\mathbb{E}^3$, sabemos que há mais do que a multiplicação de um número por um vetor, há também dois tipos de multiplicação entre vetores. Considere em particular o chamado produto escalar

$$\vec{B} \cdot \vec{A} = \left(B_x\hat{\imath} + B_y\hat{\jmath} + B_z\hat{k}\right) \cdot \left(A_x\hat{\imath} + A_y\hat{\jmath} + A_z\hat{k}\right) = B_xA_x + B_yA_y + B_zA_z\,. \tag{3.1}$$

Nota-se que o produto escalar associa dois vetores a um número (escalar). Ou seja, podemos escrever

$$\cdot \ : \mathbb{E}^3 \times \mathbb{E}^3 \to \mathbb{R} \,. \tag{3.2}$$

Em outras palavras, a multiplicação escalar denotada por " $\cdot$ " associa dois elementos de $\mathbb{E}^3$ a um número real.

Outras propriedades do produto escalar que podem ser imediatamente verificadas são a bilinearidade e sua simetria. Simetria quer dizer que

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = \vec{B} \cdot \vec{A} \,. \tag{3.3}$$

E bilinearidade se refere às seguintes propriedades, para quaisquer vetores $\vec{A}$, $\vec{B}$ e $\vec{C}$,

$$\begin{aligned} \vec{A} \cdot (\vec{B} + \vec{C}) &= \vec{A} \cdot \vec{B} + \vec{A} \cdot \vec{C} \,, \\ (\vec{A} + \vec{B}) \cdot \vec{C} &= \vec{A} \cdot \vec{C} + \vec{B} \cdot \vec{C} \,. \end{aligned} \tag{3.4}$$

O produto escalar, definido no $\mathbb{E}^3$, é um caso particular de uma estrutura mais geral chamada de *produto interno*. Vamos primeiramente definir produto interno para espaços vetoriais com corpo real.

3.2 Produto interno com corpo real

Definição 3.1: Produto interno com corpo real

O produto interno de um espaço vetorial V de corpo real atua em dois elementos do espaço V e gera um número real, satisfazendo as propriedades abaixo. Denotando essa operação por g, temos, para $|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle \in V$ e $\alpha \in \mathbb{R}$:

1. $g : V \times V \to \mathbb{R}$,
2. $g(|a\rangle, |b\rangle) = g(|b\rangle, |a\rangle)$,
3. $g(|a\rangle, |b\rangle + \alpha|c\rangle) = g(|a\rangle, |b\rangle) + \alpha g(|a\rangle, |c\rangle)$,
4. $g(|a\rangle, |a\rangle) > 0$ se $|a\rangle \neq |0\rangle$,
5. $g(|0\rangle, |0\rangle) = 0$.

Problema 3.1

A partir da definição anterior (e da definição de vetor nulo), demonstre que $g(|0\rangle, |a\rangle) = 0$.

Problema 3.2

A partir da definição 3.1, mostre que g é bilinear. Ou seja, a propriedade 3 define a linearidade do segundo membro de g, mas as demais propriedades de g são suficientes para garantir que g também é linear no primeiro membro.

O produto escalar traz consigo duas noções relevantes e que não estão presentes na definição de espaço vetorial: i) noção de comprimento (tamanho) de um vetor, dado que a norma de um vetor é dada por

$$\|\vec{A}\|^2 = \vec{A} \cdot \vec{A} \geq 0. \tag{3.5}$$

E ii) noção de *comparação* de vetores. A informação dessa comparação está em algo que geometricamente entendemos como ângulo, a saber:

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = \|\vec{A}\| \, \|\vec{B}\| \cos(\theta) \, . \tag{3.6}$$

Vetores que são colineares, como $\hat{\imath}$ e $2\hat{\imath}$, podem ser comparados diretamente usando a constante multiplicativa (no caso, 2). A situação não é imediata quando tenta-se comparar $\hat{\imath}$ com $\hat{\imath} + \hat{\jmath}$. Pode-se comparar as normas desses vetores, mas, ao fazê-lo, perde-se totalmente a informação sobre a direção.

Essas duas noções acima estão presentes em espaços com produto interno, embora de forma mais abstrata, pois a regra do produto escalar é apenas uma possível realização muito particular do produto interno.

Problema 3.3

Considere o espaço vetorial de matrizes reais 3×1. a) Defina um possível produto interno nesse espaço. b) Verifique explicitamente que o produto apresentado é realmente um produto interno.

Problema 3.4

Repita o problema anterior para o caso do espaço de matrizes reais 2×2.

No espaço $\mathcal{C}^0(a, b)$ (i.e., o espaço das funções contínuas reais de domínio entre a e b), há um produto interno usual. Sejam $|f\rangle = f(x)$ e $|h\rangle = h(x)$ elementos desse espaço, o produto interno é dado por

$$g(|f\rangle, |h\rangle) = \int_a^b f(x)g(x)dx \,. \tag{3.7}$$

Problema 3.5

Mostre que o produto anterior é realmente um produto interno.

Problema 3.6

O produto apresentado na eq. (3.7) tem uma generalização comum e útil por meio de uma função peso $w(x)$. Considerando que, para quaisquer dois vetores $|f\rangle$ e $|h\rangle$, tenhamos

$$g(|f\rangle, |h\rangle) = \int_a^b f(x)g(x)w(x)dx \,,$$

mostrar que essa definição é também compatível com a definição de produto interno, desde que w satisfaça certa condição. Que condição seria essa? Demonstre.

3.3 Bra: o dual do ket

Agora que produto interno foi definido, pode-se introduzir o dual do ket, que é chamado de bra. Esses nomes, introduzidos por Paul Dirac, são em parte uma brincadeira a partir da palavra em inglês *bracket*. Em inglês, $\langle\ \rangle$, $\{\ \}$, $[\ ]$... são todos exemplos de *brackets*. Para deixar clara a conexão, vamos primeiro introduzir a seguinte notação mais sucinta:

$$g(|a\rangle, |b\rangle) \equiv \langle a|b\rangle\,. \tag{3.8}$$

Até este ponto, é apenas uma pequena variação de notação que não indica explicitamente o símbolo g. É uma notação comum em vários textos (às vezes na forma $\langle a, b\rangle$). Dirac notou que poderia definir o símbolo $\langle a|$ e que essa definição seria útil. Assim, como $|a\rangle$ e $\langle a|$ seriam ambos objetos úteis, ele separou a palavra *bracket* para dar nome a esses objetos.

Definição 3.2: O bra

Para dado $|a\rangle \in V$, em que V é espaço vetorial com produto interno g, define-se um bra por

$$\langle a| \equiv g(|a\rangle,\ \ )\,.$$

Consequentemente, para um espaço V de corpo real, um bra associa elementos de V em números reais, ou seja, $\langle a| : V \to \mathbb{R}$.

Para dados $|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle \in V$, pode-se escrever

$$\langle a|(|b\rangle) = \langle a|b\rangle\,, \tag{3.9}$$

ou ainda, devido à linearidade g no segundo membro,

$$\langle a|(|b\rangle + |c\rangle) = \langle a|b\rangle + \langle a|c\rangle \,. \tag{3.10}$$

É interessante antes considerarmos alguns exemplos de bra. No espaço $\mathbb{E}^3$, podemos denotar a base canônica como $|e_1\rangle = \hat{\imath}, |e_2\rangle = \hat{\jmath}$ e $|e_3\rangle = \hat{k}$. Usando a definição de bra, podemos encontrar quem seria $\langle e_1|$. Pela definição, vê-se que $\langle e_1| = \hat{\imath}\cdot$. Enfatiza-se que o bra não é um vetor, ele é um operador que atua em vetores e tem como resultado um número. Ou seja, a atuação de $\langle e_1|$ em um vetor genérico do espaço $|a\rangle = \vec{a} = a_x\hat{\imath} + a_y\hat{\jmath} + a_z\hat{k}$ é simplesmente $\langle e_i|a\rangle = \hat{\imath}\cdot(a_x\hat{\imath} + a_y\hat{\jmath} + a_z\hat{k}) = a_x$. Caso não seja evidente, a_x é um número, é uma componente do vetor $\vec{a}$.

Problema 3.7

Considere o espaço vetorial de matrizes reais $M_{2,1}$. A partir de um elemento geral desse espaço, encontre o bra correspondente.

Problema 3.8

Considere o produto interno usual no espaço $C^0(a,b)$ (com função peso $w(x) = 1$). Encontre o bra nesse espaço.

Problema 3.9

Considere o vetor dado por $|\alpha a\rangle \equiv \alpha|a\rangle$, com $\alpha \in \mathbb{R}$. Encontre o bra $\langle \alpha a|$ em função de $\langle a|$.

Problema 3.10

Considere o vetor dado por $|a + \alpha b\rangle \equiv |a\rangle + \alpha|b\rangle$, com $\alpha \in \mathbb{R}$. Encontre o bra $\langle a + \alpha b|$ em função de $\langle a|$ e $\langle b|$.

3.4 Produto interno com corpo complexo

Abaixo definimos o produto interno associado a um campo vetorial de corpo complexo. A definição tem exatamente a mesma forma do caso de corpo real (ver definição 3.1), a menos das mudanças $\alpha \in \mathbb{C}$ e $g(\ ,\ ) : V \times V \to \mathbb{C}$.

Definição 3.3: Produto interno com corpo complexo

O produto interno de um espaço vetorial V de corpo *complexo* atua em dois elementos do espaço V e gera um número *complexo* satisfazendo as propriedades abaixo. Denotando essa operação por g, temos, para $|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle \in V$ e $\alpha \in \mathbb{C}$:

1. $g : V \times V \to \mathbb{C}$,
2. $g(|a\rangle, |b\rangle) = g^*(|b\rangle, |a\rangle)$,
3. $g(|a\rangle, |b\rangle + \alpha|c\rangle) = g(|a\rangle, |b\rangle) + \alpha g(|a\rangle, |c\rangle)$,
4. $g(|a\rangle, |a\rangle) > 0$ se $|a\rangle \neq |0\rangle$,
5. $g(|0\rangle, |0\rangle) = 0$.

Acima, * significa complexo conjugado e $g^*(|a\rangle, |b\rangle) \equiv [g(|a\rangle, |b\rangle)]^*$.

Usando que $g(|a\rangle, |b\rangle) \equiv \langle a|b\rangle$ e a definição de bra, podemos re-expressar as propriedades 1 a 5 da seguinte forma:

1. $\langle a| : V \to \mathbb{C}$,
2. $\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^*$,
3. $\langle a|b + \alpha c\rangle = \langle a|(|b\rangle + \alpha|c\rangle) = \langle a|b\rangle + \alpha\langle a|c\rangle$,
4. $\langle a|a\rangle \geq 0$ se $|a\rangle \neq |0\rangle$,
5. $\langle 0|0\rangle = 0$.

Problema 3.11

Mostre que

$$\langle a + \alpha b|c\rangle = \langle a|c\rangle + \alpha^*\langle b|c\rangle \,.$$

Em outras palavras, a linearidade do segundo termo do produto interno, junto da anti-simetria, implica que o primeiro termo é antilinear.

Problema 3.12

No espaço vetorial das funções complexas contínuas de domínio real em (a, b), denotado por $C^0(a, b)$, verifique que, para $|f\rangle, |g\rangle \in C^0(a, b)$,

$$\langle f|g\rangle = \int_a^b f^*(x)g(x)dx,$$

constitui um produto interno.

Observação: a função $f(x)$ descreve um caminho no espaço complexo (para cada ponto x temos um ponto no espaço complexo. Exemplos: $f(x) = x + ix, f(x) = e^{kx}$...

3.5 Norma

Todo espaço que possui um produto interno possui também naturalmente uma norma. Nos espaços $\mathbb{R}$ e $\mathbb{C}$, a norma coincide com o módulo do número. No espaço $\mathbb{E}^3$, a norma é às vezes livremente chamado de módulo, talvez devido à semelhança da operação; mas comumente norma e módulo têm definições distintas. Módulo se aplica a números, enquanto norma atua em vetores.

Existem espaços vetoriais sem produto interno, mas com uma norma bem definida. Entretanto, esses espaços não iremos tratar aqui. Aos interessados, um espaço bem citado nesse contexto é o espaço de Banach. Em MQ, espaços de Banach são gerais demais. Espaços de Hilbert são casos particulares com respeito a Banach e são essenciais para MQ.

O conceito chave de norma é o de tamanho de um vetor, em que tamanho é um número maior ou igual a zero (logo necessariamente real).

Definição 3.4: Norma

Todos os espaços com produto interno (reais ou complexos) possuem uma norma natural dada por $\|\;\| : V \to \mathbb{R}$, com, para $|a\rangle \in V$,

$$\||a\rangle\| = \sqrt{\langle a|a\rangle}$$

Nota-se que a norma é sempre nula ou positiva. Somente para o vetor nulo ela é nula.

3.6 Ortogonalidade

Definição 3.5: Ortogonalidade

Dois vetores $|a\rangle$ e $|b\rangle$ são ditos serem ortogonais se

$$\langle a|b\rangle = 0\,.$$

Da definição acima, nota-se que o vetor nulo é ortogonal a qualquer outro vetor.

Definição 3.6: Ortonormalidade

Dois vetores $|a\rangle$ e $|b\rangle$ são ditos serem ortonormais se

$$\langle a|b\rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle a|a\rangle = \langle b|b\rangle = 1\,.$$

Problema 3.13

Seja $|a\rangle$ um vetor de norma arbitrária. Encontre o vetor $|\tilde{a}\rangle$ que é proporcional a $|a\rangle$ e tal que $\langle\tilde{a}|\tilde{a}\rangle = 1$.

Problema 3.14

Mostre que o conjunto $\{|e_k\rangle\}$, com $|e_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$ e $k \in \mathbb{Z}$, constitui um conjunto de vetores ortonormais no espaço $C^0(0,2\pi)$ de funções complexas com função peso $w(x) = 1$.

3.7 Projeção de vetores

Sendo $|a\rangle, |b\rangle \in V$, denotaremos a projeção de $|a\rangle$ na direção de $|b\rangle$ por $P_{|b\rangle}|a\rangle$.

Esse operador deve ser tal que $P_{|b\rangle}|a\rangle \propto |b\rangle$. Por exemplo, a projeção do vetor $a_x\hat{\imath} + a_y\hat{\jmath}$ na direção $\hat{\imath}$ é proporcional a $\hat{\imath}$ (neste caso, podemos escrever $P_{\hat{\imath}}(a_x\hat{\imath} + a_y\hat{\jmath}) = a_x\hat{\imath}$).

Além propriedade acima, se $|a\rangle \propto |b\rangle$ então $P_{|b\rangle}|a\rangle = |a\rangle$, pois nesse caso estamos projetando um vetor $|a\rangle$ numa direção dada por $|b\rangle$ que já é a mesma direção de $|a\rangle$, logo a projeção não deve fazer nada neste caso. Essa propriedade é na verdade a propriedade central de projetores e nos leva à definição geral.

Definição 3.7: Definição geral de operador de projeção

Dizemos que um operador linear $P : V \to V$ é um operador de projeção se $P(P|a\rangle) = P|a\rangle$ para qualquer $|a\rangle \in V$.

De forma mais sucinta, pode-se dizer que um operador linear P é operador de projeção se $P^2 = P$.

Considere o seguinte operador

$$P_{|b\rangle} = \frac{|b\rangle\langle b|}{\langle b|b\rangle}\,. \tag{3.11}$$

Nota-se que é um operador linear, pois $P_{|b\rangle}(|a\rangle + |c\rangle) = P_{|b\rangle}|a\rangle + P_{|b\rangle}|c\rangle$, devido à linearidade do bra. Nota-se também que

$$P^2_{|b\rangle}|a\rangle = \frac{|b\rangle\langle b|}{\langle b|b\rangle}\left(\frac{|b\rangle\langle b|a\rangle}{\langle b|b\rangle}\right) = \frac{|b\rangle\langle b|a\rangle}{\langle b|b\rangle} = P_{|b\rangle}|a\rangle\,. \tag{3.12}$$

Consequentemente, o operador dado pela eq. (3.11) é operador de projeção.

Comumente lidamos com o caso de projetar numa direção que é normalizada. Neste caso, sendo $\langle e|e\rangle = 1$, temos

$$P_{|e\rangle} = |e\rangle\langle e|\,. \tag{3.13}$$

Problema 3.15

No espaço $\mathbb{E}^2$, expresse $P_{\hat{\imath}}$ usando a notação vetorial usual. Verifique explicitamente que o operador proposto é realmente um operador de projeção.

Problema 3.16

Num espaço vetorial V de base ortonormal dada por $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{3}$, encontre a projeção de um vetor $|a\rangle \in V$ no subespaço gerado por $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$. Escreva explicitamente $P_{|e_1\rangle,|e_2\rangle}$, que é o operador de projeção para esse subespaço.

3.8 Ortogonalização de Gram-Schmidt

Dado uma base $B = \{|a_i\rangle\}_{i=1}^{N}$ de um espaço vetorial V com produto interno, é sempre possível encontrar nova base $B_\perp = \{|e_i\rangle\}_{i=1}^{N}$ do mesmo espaço que seja ortonormal.

Em matemática, há vários resultados da forma "dado A, existe B", sem explicar como obter B, apenas garantindo que existe. Felizmente este não é o caso aqui. Podemos usar o próprio método de Gram-Schmidt tanto para provar a existência de base ortonormal como para providenciar um método passo a passo de como encontrar a base ortonormal.

O procedimento é dado pelos passos abaixo:

1. Escolher um vetor qualquer da base original B e definir o primeiro elemento de $B_\perp$ normalizando ele. Ou seja,
$$|e_1\rangle = \frac{|a_1\rangle}{\sqrt{\langle a_1|a_1\rangle}} \,. \tag{3.14}$$

2. Encontrar um vetor $|e_2'\rangle$ que seja ortogonal a $|e_1\rangle$. Para isso, começamos com $|a_2\rangle$, mas subtraímos desse vetor sua parte "paralela" a $|e_1\rangle$, ou seja, retiramos a projeção na direção de $|e_1\rangle$. Logo
$$|e_2'\rangle = |a_2\rangle - P_{|e_1\rangle}|a_2\rangle \,. \tag{3.15}$$
É fácil verificar que $\langle e_2'|e_1\rangle = 0$.

3. Como $|e_2'\rangle$ não está necessariamente normalizado, normalizamos ele usando
$$|e_2\rangle = \frac{|e_2'\rangle}{\sqrt{\langle e_2'|e_2'\rangle}} \,. \tag{3.16}$$

4. Para definir $|e_3'\rangle$ precisamos agora de um projetor no subespaço gerado por $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$, a saber

$$|e_3'\rangle = |a_3\rangle - |e_1\rangle\langle e_1| - |e_2\rangle\langle e_2|\,. \tag{3.17}$$

   Verifica-se que, como esperado, $|e_3'\rangle$ é ortogonal a $|e_1\rangle$ e $|e_2\rangle$.

5. Normaliza-se $|e_3'\rangle$, o que leva a $|e_3\rangle$. Em seguida, repete-se o procedimento N vezes, até encontrar a base ortonormal $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{N}$.

Isto conclui a apresentação da orgtogonalização de Gram-Schmidt.

Problema 3.17

Considere que dado espaço V possui base $\{|a_1\rangle, |a_2\rangle\}$ com

$$(\langle a_i|\, a_j\rangle) = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 5 \end{pmatrix}.$$

Encontre uma base ortonormal $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{2}$ para este espaço em função da base original.

Problema 3.18

Os monômios x^n, com $n \in \mathbb{N}$ e $x \in \mathbb{R}$, formam uma base para o espaço $C^\infty(0,1)$. Considerando o produto interno natural desse espaço com função peso $w(x) = 1$, encontre dois elementos de uma base ortonormal neste espaço.

Problema 3.19

Num espaço vetorial complexo, sendo $|c\rangle = P_{|a\rangle}|b\rangle$, mostre que $\langle c|c\rangle = \langle b|P_{|a\rangle}|b\rangle = |\langle a|b\rangle|^2/\langle a|a\rangle$.

3.9 Desigualdade de Schwarz (ou Cauchy-Schwarz)

Teorema 3.1 Desigualdade de Schwarz

Seja V um espaço vetorial com produto interno. E sejam $|a\rangle, |b\rangle \in V$. Logo

$$\langle a|a\rangle \langle b|b\rangle \geq |\langle a|b\rangle|^2 \ ,$$

em que a igualdade somente é válida caso $|a\rangle \propto |b\rangle$.

Demonstração: Considere $|c\rangle = |b\rangle - P_{|a\rangle}|b\rangle$. Consequentemente, $\langle c|c\rangle = \langle b|b\rangle + \langle b|P_{|a\rangle}P_{|a\rangle}|b\rangle - 2\langle b|P_{|a\rangle}|b\rangle = \langle b|b\rangle - \langle b|P_{|a\rangle}|b\rangle = \langle b|b\rangle - |\langle a|b\rangle|^2/\langle a|a\rangle$. Como $\langle c|c\rangle \geq 0$, temos

$$0 \leq \langle b|b\rangle \langle a|a\rangle - |\langle a|b\rangle|^2 \, ,$$

logo

$$|\langle a|b\rangle|^2 \leq \langle b|b\rangle \langle a|a\rangle \, .$$

Conclui-se também que, se $|a\rangle \propto |b\rangle$ temos que $P_{|a\rangle}|b\rangle = |b\rangle$ e portanto $\langle c|c\rangle = 0$, logo vale a igualdade: $\langle a|a\rangle \langle b|b\rangle = |\langle a|b\rangle|^2$. ■

Problema 3.20

Particularize a desigualdade acima para o espaço $\mathbb{E}^3$. Compare o resultado com $\vec{A} \cdot \vec{B} = AB\cos\theta$.

Problema 3.21

Use a desigualdade de Schwarz para provar que

$$\left(\sum_i a_i\right)^2 \leq \left(\sum_i \frac{a_i^2}{b_i^2}\right)\left(\sum_j b_j^2\right) \, .$$

Observação: A versão unidimensional da expressão acima é uma trivialidade, $a^2 \leq \frac{a^2}{b^2} b^2$. A partir da dimensão 2, o resultado não é óbvio, a saber: $(a_1 + a_2)^2 \leq \left(\frac{a_1^2}{b_1^2} + \frac{a_2^2}{b_2^2} \right) (b_1^2 + b_2^2)$.

CAPÍTULO 4

Operadores lineares

4.1 Operadores e funcionais lineares

Definição 4.1: Operador linear

Se A transforma elementos de um espaço vetorial V em outros elementos do mesmo espaço, escrevemos $A : V \to V$. Caso a atuação de A seja linear, ou seja, caso

$$A(|a\rangle + \alpha|b\rangle) = A|a\rangle + \alpha A|b\rangle\,,$$

A é chamado de operador linear.

Nota:-

A atuação de operadores sobre um elemento do espaço vetorial é normalmente denotada sem o uso de parênteses, a menos quando necessário a fim de evitar dúvidas, como em $A(|a\rangle + |b\rangle)$. O uso de $A(|a\rangle)$ não é aconselhado. Isto é bem semelhante com o que ocorre com a atuação da derivada: só usamos parênteses quando necessário. No contexto de funções, o padrão é usar parênteses sempre ou omitir o argumento. Ou seja, para funções comumente escreve-se $f(x)$ ou mesmo só f, mas não se usa $f\, x$. Por outro lado, usa-se $\vec{\nabla} f$ ou $\frac{df}{dx}$, ao invés de $\vec{\nabla}(f)$ ou $\frac{d}{dx}(f)$.

Embora o bra atue de forma linear, ele não é um operador linear em V, como acima definido. Isto pois, num espaço vetorial real, $\langle a| : V \to \mathbb{R}$. Os bras são mais precisamente funcionais lineares, como abaixo definidos.

Definição 4.2: Funcional linear

Considere um espaço vetorial de corpo real ou complexo, denotado de forma geral por $\mathbb{F}$. Seja $A : V \to \mathbb{F}$. Se a atuação de A for linear, ou seja, se

$$A(|a\rangle + \alpha|b\rangle) = A|a\rangle + \alpha A|b\rangle\,,$$

então A é chamado de funcional linear.

Problema 4.1

Embora $\langle a|$ seja um funcional linear, mostre que, para $|a\rangle, |b\rangle \in V$, $C = |a\rangle\langle b|$ é operador linear.

4.2 Relação de completeza

Seja V um espaço vetorial de base ortonormal $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{N}$. Seja $|f\rangle \in V$. Portanto, pela definição de base, existem números $\{f_i\}_{i=1}^{N}$ pertencentes ao corpo de V tais que $|f\rangle = \sum_{i=1}^{N} f_i |e_i\rangle$. Usando que a base é ortonormal, vem

$$\langle e_j | f\rangle = \langle e_j| \left(\sum_{i=1}^{N} f_i|e_i\rangle\right) = \sum_{i=1}^{N} f_i \langle e_j|e_i\rangle = \sum_{i=1}^{N} f_i\delta_{\mathrm{ij}} = f_j.$$

Ou seja,

$$f_j = \langle e_j | f\rangle\,.$$

Portanto, podemos dizer que

$|f\rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle e_i|f\rangle\, |e_i\rangle = \sum_{i=1}^{N} |e_i\rangle \langle e_i|f\rangle = \left(\sum_{i=1}^{N} |e_i\rangle \langle e_i|\right) |f\rangle.$

Como a relação acima é válida para qualquer $|f\rangle \in V$, concluímos que

$\sum_{i=1}^{N} |e_i\rangle\langle e_i| = \mathbf{1}.$

A relação acima é chamada de **relação de completeza**. Qualquer base ortonormal precisa satisfazer a relação de completeza exatamente nesta forma.

Para uma base de um espaço vetorial V não necessariamente ortonormal, $\{|a_i\rangle\}_{i=1}^{N}$, a relação de completeza é dada por

$$\sum_{i=1}^{N} P_{|a_i\rangle} = \mathbf{1}\,. \tag{4.1}$$

Se a soma não incluir todos os elementos da base, a resposta no lado direita não será um operador identidade no espaço V. Vem disto o uso de "completeza", isto é, de que o conjunto de vetores usados é completo, ele gera o espaço vetorial tratado.

A relação de completeza pode ser corretamente interpretada como uma projeção do espaço V nele mesmo. Por isso leva à identidade.

Problema 4.2

Escreva relação de completeza do espaço $\mathbb{E}^3$.

4.3 Representação matricial de um operador linear

Como só lideraremos com operadores lineares é possível considerarmos uma representação matricial para eles.

Seja V um espaço vetorial de dimensão N munido da base ortonormal $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{N}$. Para qualquer operador linear A em V e para qualquer $|b\rangle \in V$,

$$
\begin{aligned}
A|b\rangle &= A\sum_{i=1}^{N} b_i|e_i\rangle = \sum_{i=1}^{N} b_i A|e_i\rangle \quad \text{(}A\text{ é linear)} \\
&= \sum_{i,j=1}^{N} b_i|e_j\rangle\langle e_j|A|e_i\rangle \quad \text{(relação de completeza)} \\
&= \sum_{i,j=1}^{N} b_i A_{ji}|e_j\rangle \quad \text{(usando } A_{ji} \equiv \langle e_j|A|e_i\rangle\text{)} \\
&= \sum_{j} c_j|e_j\rangle\,.
\end{aligned} \tag{4.2}
$$

Nota-se que (A_{ji}) forma uma matriz $N \times N$ de números reais ou complexos (dependendo do corpo de V).

Com o resultado acima, nota-se que podemos escrever

$$
(A_{ji}) \cdot (b_i) = (c_j)\,, \tag{4.3}
$$

em que o símbolo $\cdot$ acima é o produto de matrizes.

A atuação do operador A sobre um ket $|b\rangle$, de componentes b_i, leva a um ket de componentes c_i. E esse mesmo ket de componentes c_i pode ser encontrado pela multiplicação da matriz cujas componentes são dadas por A_{ji} pela matriz de componentes b_i.

Em conclusão, como utilizamos elementos gerais de um espaço vetorial V, podemos concluir que todo operador linear pode ser representado por uma matriz e que a atuação de qualquer operador sobre um vetor pode ser representada pela multiplicação de uma matriz de dimensão $\dim V \times \dim V$ por uma matriz coluna ($\dim V \times 1$).

Definição 4.3: Representação matricial de operador

Seja $A : V \to V$ operador linear e seja $\{|f_i\rangle\}$ base de V. A representação matricial de A na base $\{|f_i\rangle\}$ é

$$A_{ij} \equiv \langle f_i|A|f_j\rangle \,.$$

Problema 4.3

Considere um espaço V com duas bases ortonormais $\{|e_i\rangle\}$ e $\{|f_i\rangle\}$. Para cada uma dessas bases, podemos encontrar uma representação matricial para um operador A. Encontre a relação entre essas bases.

Problema 4.4

Seja M_θ um operador rotação em $\mathbb{E}^2$, isto é M_θ roda os vetores por um ângulo θ. Assim, para qualquer $\vec{v} \in \mathbb{E}^2$, temos $\vec{v} \cdot (M_\theta \vec{v}) = v^2 \cos(\theta)$. Encontre a representação matricial de M_θ na base canônica $\{\hat{\imath}, \hat{\jmath}\}$. Observação: talvez você já saiba a resposta, mas comece calculando usando a Definição 4.3.

Problema 4.5

No espaço $C^\infty(0,1)$, encontre a representação matricial da derivada considerando a base $\{|n\rangle = x^n\}_{n=0}^{\infty}$.

4.4 O adjunto de um operador e operadores Hermitianos

Sabemos que para todo ket podemos encontrar um bra. $A|a\rangle \equiv |Aa\rangle$ é um ket. O bra correspondente é dado por $\langle Aa| = g(|Aa\rangle,)$. Como $\langle Aa| : V \to \mathbb{F}$, deve existir algum operador $A^\dagger$ tal que $A^\dagger : V \to V$ e $\langle Aa| = \langle a|A^\dagger$. Primeiro veremos a definição em detalhe, e em seguida um exemplo que mostra que, em geral, $A^\dagger \neq A$. Veremos também que operadores que satisfazem $A = A^\dagger$ são um caso especialmente importante e são chamados de Hermitianos. Em mecânica quântica, operadores Hermitianos têm um papel central. Todas as grandezas observáveis (como posição, momento, energia...) são autovalores de operadores Hermitianos. Veremos também que, independentemente da mecânica quântica, identificar operadores diferenciais como Hermitianos auxilia no entendimento das soluções de equações diferenciais.

Definição 4.4: Adjunto de um operador (ou conjugação Hermitiana)

Sejam $A : V \to V$ um operador linear e $|a\rangle \in V$. Sendo $\langle Aa|$ o bra obtido a partir do ket $|Aa\rangle \equiv A|a\rangle$, o operador adjunto a A é o operador $A^\dagger : V \to V$ e dado pela relação

$$\langle a|A^\dagger = \langle Aa| \,.$$

Equivalentemente, pode-se também definir $A^\dagger$ pela relação abaixo:

$$\langle a|A^\dagger|b\rangle = \langle b|A|a\rangle^* \,.$$

As duas definições acima são equivalentes pois,

$$\langle a|A^\dagger|b\rangle = \langle Aa|b\rangle = \langle b|Aa\rangle^* = \langle b|A|a\rangle^* \,. \tag{4.4}$$

Como não existe complexo conjugado de um ket, pois a conjugação complexa só faz sentido quando atua em números, é comum usar $\langle b|A|a\rangle^* \equiv (\langle b|A|a\rangle)^*$.

Exemplo 4.1

Considere o operador $A = |a\rangle\langle b|$. A é um operador linear pois a atuação de A sobre um ket qualquer $|c\rangle$ é $A|c\rangle = \langle b|c\rangle|a\rangle \in V$ e a linearidade de A é consequência imediata da linearidade de $\langle b|$. Calculemos agora quem seria $A^\dagger$:

$$\langle Ac|d\rangle = g(|Ac\rangle, |d\rangle) = g(\langle b|c\rangle|a\rangle, |d\rangle) = \langle b|c\rangle^* \, g(|a\rangle, |d\rangle) = \langle b|c\rangle^* \, \langle a|d\rangle.$$

Acima, usamos a antilinearidade do primeiro membro do produto interno. Agora fica fácil concluir que

$$\langle Ac|d\rangle = \langle c|b\rangle \, \langle a|d\rangle = \langle c|(|b\rangle\langle a|)|d\rangle \,.$$

Portanto, como $\langle Ac|d\rangle = \langle c|A^\dagger|b\rangle$,

$$A^\dagger = |b\rangle\langle a| \neq |a\rangle\langle b| = A\,.$$

Exemplo 4.2

Num espaço vetorial de corpo complexo V, considere um operador bem simples, $A = \alpha\mathbb{1}$, em que $\alpha \in \mathbb{C}$. Encontre $A^\dagger$.

$$\langle a|A^\dagger|b\rangle = \langle b|Aa\rangle^* = \langle b|(\alpha\mathbb{1})|a\rangle^* = \alpha^*\langle b|a\rangle^* = \alpha^*\langle a|b\rangle\,,$$

logo, como $|a\rangle$ e $|b\rangle$ são vetores arbitrários de V, $A^\dagger = \alpha^*\,\mathbb{1}$.

Problema 4.6

Seja $\{|e_i\rangle\}$ base ortonormal de V, em que V é um espaço vetorial de corpo complexo. Seja A um operador linear em V dado por $A = \sum_{i,j} a_{ij}|e_i\rangle\langle e_j|$, em que $a_{ij} \in \mathbb{C}$. Pede-se:

i) Encontre a representação matricial de A na base $\{|e_i\rangle\}$.

ii) Encontre $A^\dagger$.

iii) Encontre a representação matricial de $A^\dagger$ na base $\{|e_i\rangle\}$.

Dada uma base $\{|e_i\rangle\}$ de V, sabemos que a representação matricial de $A : V \to V$ é dada pelas componentes $A_{ij} = \langle e_i|A|e_j\rangle$. Uma pergunta natural é qual a relação entre a representação matricial de A com a de $A^\dagger$. Isto é fácil de encontrar, pela definição de $A^\dagger$:

$$A^\dagger_{ij} = \langle e_i|A^\dagger|e_j\rangle = \langle e_j|A|e_i\rangle^* = A^*_{ji}\,. \tag{4.5}$$

Acima, nota-se a inversão do índices [isto é, $(i,j) \to (j,i)$] e o aparecimento da conjugação complexa. Como todo operador linear pode ser representado por uma matriz, sem perda de informação, vemos que encontrar o adjunto de um operador A é o mesmo que fazer uma simples mudança na representação matricial de A, a saber:

$$(A^\dagger_{ij}) = (A^*_{ij})^t = (A^*_{ji}) \tag{4.6}$$

em que ^{t} é a operação de transposição.

Acima, $A^\dagger_{ij}$ se refere às componentes i, j da representação matricial de $A^\dagger$. É comum e útil definir a operação de conjugação Hermitiana de uma matriz como segue.

Definição 4.5: Conjugação Hermitiana de uma matriz

Para uma matriz M quadrada qualquer, define-se sua conjugação Hermitiana pelo complexo conjugado de sua transposta, ou seja, $M^\dagger \equiv (M^t)^*$.

Equivalentemente, as componentes de $M^\dagger$ são dadas por $M^\dagger_{ij} = M^*_{ji}$.

Definição 4.6: Matrizes e operadores Hermitianos e anti-Hermitianos

Uma matriz Hermitiana é uma matriz que é igual à sua conjugação Hermitiana. Ou seja, sendo M uma matriz quadrada, $M = M^\dagger$. Uma matriz anti-Hermitiana satisfaz $M^\dagger = -M$.

Para operadores, as definições são essencialmente as mesmas. A saber, um operador Hermitiano $A : V \to V$ é um operador que é igual ao seu adjunto, $A = A^\dagger$. Um operador anti-Hermitiano satisfaz $A^\dagger = -A$.

Exemplos de matrizes Hermitianas e anti-Hermitianas:

1. Toda matriz real simétrica (i.e., $M = M^t$) é uma matriz Hermitiana.

2. $\begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 2 \end{pmatrix}$ é Hermitiana.

3. $i \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}$ é anti-Hermitiana.

Problema 4.7

Mostre que toda matriz quadrada real M pode ser decomposta em $M = S + A$, sendo S matriz simétrica ($S = S^t$) e A anti-simétrica ($A = -A^t$).

Dica: este problema é importante e rápido de resolver, mas requer certa imaginação caso nunca tenha feito exercício semelhante.

Problema 4.8

Semelhantemente ao problema anterior, mostre que qualquer operador linear A pode ser decomposto em dois operadores Hermitianos X e Y tais que $A = X + iY$.

Problema 4.9

Considere o espaço de funções reais diferenciáveis definidas entre os extremos a e b, e tais que se anulam nesses extremos. Considere o produto interno usual desse espaço (com função peso $w = 1$). O operador ∂_x é um operador Hermitiano nesse espaço? Considere a mesma questão para ∂_x^2.

Problema 4.10

Repita o problema anterior considerando funções complexas ao invés de reais (junto do produto interno adequado para esse caso). Considere também se $i\partial_x$ é operador Hermitiano.

Textos em contextos mais matemáticos introduzem diferenças entre operadores Hermitianos, auto-adjuntos ou simétricos. Tal como comumente adotado em livros de física matemática para físicos, não vamos entrar aqui nessas distinções. Aos interessados, há várias possíveis fontes de informação, por exemplo [1].

CAPÍTULO 5

Espaços de Hilbert

A mecânica quântica é baseada em espaços vetoriais consideravelmente gerais, quando comparados com o $\mathbb{E}^3$, por exemplo. Por outro lado, está longe de tratar dos espaços vetoriais mais gerais possíveis, algumas propriedades chaves são necessárias. A saber: usa espaço vetorial de corpo complexo, com produto interno e completo. O último termo "completo" não apresentamos ainda a definição.

A fim de motivar a apresentação que se segue, na mecânica quântica estados de um sistema são associados a vetores (kets). Por exemplo, o estado de uma partícula de momento $\vec{p}$ é descrito pelo ket $|\vec{p}\rangle$, que é o elemento do espaço de Hilbert.[1] Suponha que, dada uma sequência de estados quânticos possíveis de serem realizados $(|\vec{p}_1\rangle, |\vec{p}_2\rangle, \ldots)$, esses estados se aproximem cada vez mais de um outro vetor $\lim_{n\to\infty} |\vec{p}_n\rangle = |\vec{s}\rangle$. Em princípio, matematicamente, é possível que todos os estados $\{|p_n\rangle\}$ sejam possíveis de serem realizados fisicamente, mas o estado assintótico $|p_f\rangle$ não seja físico (isto é,

[1]O ket $|\vec{p}\rangle$ é um ket que depende de todas as componentes do vetor $\vec{p}$, ou seja, $|\vec{p}\rangle$ é uma notação compacta para $|\vec{p}\rangle = |p_x, p_y, p_z\rangle$.

que viole alguma propriedade que todo estado físico deveria satisfazer). Embora matematicamente possível, a experiência na mecânica quântica sugere o contrário: ou seja, estados assintóticos de uma sequência de estados físicos são também físicos. Essa propriedade, do estado assintótico de um espaço ser também um membro do espaço, está associada à noção de espaço completo, que iremos definir em detalhes em breve.

Como veremos, a definição de espaço de Hilbert é muito simples: é um espaço vetorial com produto interno e completo. Falta saber o que significa o espaço ser completo de forma mais precisa. Para isso, antes teremos de rever a definição de convergência de sequência e introduzir a sequência de Cauchy.

Dizer que uma sequência de números $(a_1, a_2, ...)$, com $a_n \in \mathbb{R}$, converge para $a \in \mathbb{R}$, ou seja $\lim_{n\to\infty} a_n = a$, por definição quer dizer que: para dado $\varepsilon > 0$ existe um n_0 tal que $n > n_0$ implica em $|a - a_n| < \varepsilon$. Pode-se demonstrar que[2]

$$\text{Dado } \ \varepsilon > 0, \ \exists n_0 \ \text{ tal que } \ n > n_0 \implies |a_n - a| < \varepsilon \,. \tag{5.1}$$

$$\Downarrow$$

$$\text{Dado } \ \varepsilon > 0, \ \exists n_0 \ \text{ tal que } \ n, m > n_0 \implies |a_n - a_m| < \varepsilon \,. \tag{5.2}$$

Uma sequência que satisfaz a expressão (5.1) é dita convergir para a. Ou seja, $\lim_{m\to\infty} a_n = a$. Uma sequência que satisfaça a expressão (5.2) é dita ser sequência de Cauchy. Enquanto a primeira expressão indica que a sequência (a_n) se aproxima de a; a expressão seguinte não faz menção para que valor a sequência (a_n) converge, mas informa que os elementos da sequência estão cada vez mais próximos entre si. O resultado acima diz que toda sequência convergente é necessariamente de Cauchy. Embora acima estejamos considerando números reais, esse resultado é bem geral, em particular, isso é válido para qualquer espaço com produto interno.

Para o espaço dos números reais, pode-se mostrar que vale a recíproca, ou seja, que toda

[2] A demonstração é simples, o passo chave é usar que, para n suficientemente grande, temos $|a_n - a| < \varepsilon$, logo, para n e m suficientemente grandes, podemos escrever que $|a_n - a_m| = |a_n - a + a - a_m| < |a_n - a| + |a_m - a| < 2\varepsilon$.

sequência de Cauchy é necessariamente convergente. É fácil mostrar que essa propriedade do espaço $\mathbb{R}$ não é válida para qualquer espaço. Por exemplo, considere o espaço $\mathbb{R}\backslash\{0\}$, ou seja, o espaço dos números reais do qual foi retirado o elemento 0. Para $n \to \infty$, a sequência de termo geral $a_n = 1/n$ é uma sequência de Cauchy (é fácil demonstrar isso, mas não vamos fazer aqui). No espaço $\mathbb{R}$, claramente $\lim_{n\to\infty} a_n = 0$. Contudo, não existe nenhum elemento $x \in \mathbb{R}\backslash\{0\}$ que satisfaça $\lim_{n\to\infty} 1/n = x$.

A demonstração de que os espaços $\mathbb{R}$ e $\mathbb{C}$ são completos não faz parte de nosso curso, mas pode ser vista em *[referência a ser inserida]*.

Um espaço em que toda sequência de Cauchy é convergente é chamado de espaço completo. A seguir, vamos definir em detalhes esses conceitos em espaços vetoriais mais gerais do que o $\mathbb{R}$.

Problema 5.1

Mostre pela definição que $\lim_{n\to\infty} 1/n = 0$. Dica: você provavelmente já fez esse exercício num curso de cálculo. Caso não se lembre, é um exercício clássico, é fácil de encontrar em diversas fontes.

5.1 Convergência e espaços completos

Definição 5.1: Convergência de sequência

Seja $(|a_1\rangle, |a_2\rangle, ...)$ uma sequência de vetores $|a_n\rangle \in V$. Dizemos que a sequência converge se existir $|a\rangle \in V$ que satisfaça

$$\text{Dado } \varepsilon > 0,\ \exists n_0 \text{ tal que } n > n_0 \implies ||\,|a_n\rangle - |a\rangle\,|| < \varepsilon\,.$$

De forma mais compacta, denota-se $\lim_{n\to\infty} |a_n\rangle = |a\rangle$.

Definição 5.2: Sequência de Cauchy

Seja $(|a_1\rangle, |a_2\rangle, \ldots)$ uma sequência de vetores $|a_n\rangle \in V$. Dizemos que a sequência é de Cauchy se

$$\text{Dado } \varepsilon > 0,\ \exists n_0 \text{ tal que } n, m > n_0 \implies ||\, |a_n\rangle - |a_m\rangle \,|| < \varepsilon \,.$$

De forma mais sucinta, escreve-se $\lim_{n,m\to\infty} ||\, |a_n - a_m\rangle \,|| = 0$.

Usando a desigualdade triangular[3] (isto é, $||\, |a+b\rangle \,|| \leq ||\, |a\rangle \,|| + ||\, |b\rangle \,||$) mostra-se que toda sequência convergente é necessariamente sequência de Cauchy.

Definição 5.3: Espaço completo

É chamado de espaço completo um espaço em que toda sequência de Cauchy é uma sequência convergente.

Questão desafio 5.1

Mostre que o espaço dos números racionais $\mathbb{Q}$ não é completo. Estratégia: busque por uma sequência de números racionais que convirja para um número irracional.

Exemplo 5.1

Sabendo que os espaços $\mathbb{R}$ e $\mathbb{C}$ são completos, mostre que todo espaço vetorial V de dimensão finita e com produto interno é necessariamente um espaço completo.

Seja a sequência $(|a_n\rangle)$ uma sequência de Cauchy em V. Como V tem dimensão finita, podemos escrever, para cada $|a_n\rangle$:

$$|a_n\rangle = \sum_i a_{ni} |e_i\rangle \,,$$

em que $a_{ni} \in \mathbb{C}$ e $\{|e_i\rangle\}$ é base ortonormal cujo número de elementos é igual à dimensão de V. Podemos também escrever, para dados m e n,

$$|a_n\rangle - |a_m\rangle = |a_n - a_m\rangle = \sum_i (a_{ni} - a_{mi}) |e_i\rangle \,.$$

[3] É uma consequência da desigualdade de Schwarz.

Como $\{|e_i\rangle\}$ é base ortonormal,

$$|| \, |a_n - a_m\rangle \, ||^2 = \langle a_n - a_m | a_n - a_m \rangle = \sum_i |a_{mi} - a_{ni}|^2 \, .$$

Como $(|a_n\rangle)$ é sequência de Cauchy, para dado $\varepsilon > 0$, exitem n e m suficientemente grandes tais que $|| \, |a_n - a_m\rangle \, || = \sqrt{\sum_i |a_{mi} - a_{ni}|^2} < \varepsilon$. Como $\{a_{ni}\}$ são números complexos, e como $\mathbb{C}$ é completo, existe $a_i \in \mathbb{C}$ tal que, para n suficientemente grande, $\sqrt{\sum_i |a_i - a_{ni}|^2} < \varepsilon$. Assim, sendo $|a\rangle \equiv \sum_i a_i |e_i\rangle$, podemos então escrever $\lim_{n\to\infty} |a_n\rangle = |a\rangle$.
Consequentemente, toda série de Cauchy em um espaço vetorial V de dimensão finita e munido de produto interno é convergente. Logo, V é completo.

O exemplo anterior é geral no sentido de ser válido para qualquer V de dimensão finita e com produto interno. Mas não é tão geral a ponto de incluir todos os casos de dimensão infinita. A diferença chave ocorre para dimensão infinita e não-enumerável, ou seja, quando a base é indexada por um índice contínuo (real) ao invés de um número inteiro. Por exemplo, uma base dada por $\{|e_x\rangle\}_{x\in\mathbb{R}}$. Veremos exemplos de base não enumerável em breve.

Problema 5.2

Mostre que o espaço $C^0(a, b)$ de funções reais não é um espaço completo.
Dica: A essência da demonstração é construir uma sequência de funções contínuas que convirja para uma função descontínua. Isso é mais intuitivo do que pode parecer, há várias construções possíveis. Ver Exemplo 7.5.1 do livro do Hassani para um caso concreto.

5.2 O espaço L^2

Vimos que o espaço das funções contínuas com domínio em não é um espaço completo. Há porém um espaço de funções que generaliza esse último e é muito importante tanto no contexto quântico quanto clássico. Trata-se do espaço das funções de quadrado integrável, que é comumente denotado por L^2.

Definição 5.4: Espaços L^2

O espaço $L^2_w(a,b)$ é formado pelo conjunto de funções $f : [a,b] \to \mathbb{C}$ tais que

$$\int_a^b |f(x)|^2 w(x) dx \in \mathbb{R},$$

em que $w(x)$ é a função peso ($w(x) > 0 \quad \forall x \in [a,b]$). Comumente, o contexto deixa claro os limites de integração e a função peso, assim comumente denotam-se esses espaços por L^2 apenas.

Para $f, g \in L^2$, o produto interno de L^2 é dado por

$$\langle f|g\rangle = \int_a^b f^*(x) g(x) w(x) dx .$$

Problema 5.3

Verifique que L^2 é espaço vetorial.

Problema 5.4

Apresente um exemplo simples de função em L^2 que não é elemento de C^0.

Problema 5.5

Mostre que se $f, g \in L^2$, então $\int_a^b f^*(x) g(x) w(x) dx$ converge. Dica: use a desigualdade de Schwarz.

Nota-se que L^2 é um espaço vetorial com produto interno. Nota-se também que para dada função peso e intervalo de integração, o espaço L^2 contém C^0. Anteriormente vimos que C^0 não pode ser um espaço completo, pois é possível definir uma sequência de Cauchy de elementos de C^0 que não converge para nenhum elemento de C^0, pois a convergência se dá para uma função descontínua. Como funções contínuas por partes são integráveis, esse nosso contra exemplo nada diz sobre se L^2 é completo ou não. O teorema a seguir diz que L^2 é espaço completo.

Teorema 5.1 Teorema de Reisz-Fisher

O espaço L^2 é completo. Consequentemente, o espaço L^2 é espaço de Hilbert.

O teorema acima é de grande importância. A demonstração está além de nosso curso e pode ser encontrada em vários livros de análise real.

Questão desafio 5.2

A demonstração está além dos propósitos centrais de nosso curso, mas é possível ser feita por alunos do curso com maior inclinação para matemática. Assim, como questão desafio, pede-se demonstrar o teorema de Reisz-Fisher para L^2. Ressalta-se que, embora seja comum encontrar uma versão desse teorema para a espaços mais gerais, do tipo L^p, para esta questão sugere-se fazer o caso $p = 2$. Considerar também, por simplicidade, domínio finito e função peso $w = 1$.

5.3 Autovalores e autovetores de operadores Hermitianos

Seja $A : V \to V$ um operador, encontrar seus autovalores e autovetores significa buscar pelas soluções de $|u\rangle \in V$ e $\lambda \in \mathbb{C}$ que satisfazem

$$A|u\rangle = \lambda|u\rangle\,, \tag{5.3}$$

em que $|u\rangle$ é vetor não nulo.

Teorema 5.2

Todos os autovalores de operadores Hermitianos são reais.

Demonstração: Seja $A = A^\dagger$ e seja $A|u\rangle = \lambda|u\rangle$. Logo,

$$\langle u|A|u\rangle = \lambda\langle u|u\rangle\,.$$

Pela definição de operador adjunto $\langle u|A|u\rangle = \langle u|A^\dagger|u\rangle^*$. Mas, como A é Hermitiano, podemos escrever

$$\langle u|A|u\rangle = \langle u|A|u\rangle^* = \lambda^*\langle u|u\rangle\,.$$

Logo,

$$\lambda = \lambda^*\,.$$

■

Teorema 5.3

Autovetores de operadores Hermitianos, associados a autovalores distintos, são ortogonais entre si.

Demonstração: Seja $A = A^\dagger$ e $A|u_n\rangle = \lambda_n|u_n\rangle$. Logo, aplicando o bra com outro autovetor, $\langle u_m|$,

$$\langle u_m|A|u_n\rangle = \lambda_n\langle u_m|u_n\rangle\,. \tag{5.4}$$

Por outro lado, como A é Hermitiano,

$$\langle u_m|A|u_n\rangle = \langle u_n|A|u_m\rangle^* = \lambda_m^*\langle u_n|u_m\rangle^* = \lambda_m\langle u_m|u_n\rangle\,. \tag{5.5}$$

Na última igualdade usamos que λ_m é real, como visto no teorema anterior.

Como as duas últimas equações são iguais entre si, subtraindo uma da outra, obtemos

$$0 = (\lambda_n - \lambda_m)\langle u_m|u_n\rangle\,. \tag{5.6}$$

Sendo $\lambda_m \neq \lambda_n$, concluímos que $\langle u_m|u_n\rangle = 0$, o que demonstra o teorema.

■

Problema 5.6

Seja $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^N$ base ortonormal de V. Re-expresse a equação $A|u_n\rangle = \lambda_n|u_n\rangle$ como um problema de autovalores e autovetores da matriz (A_{ij}) que representa o operador A na dada base.

Problema 5.7

Em um espaço V de base ortonormal $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$, encontre as representações matriciais, os autovalores e os autovetores dos operadores A= $3|e_1\rangle\langle e_1|$, B= $3|e_1\rangle\langle e_1| + i|e_1\rangle\langle e_2| - i|e_2\rangle\langle e_1|$ e $C = 3|e_1\rangle\langle e_1| + i|e_1\rangle\langle e_2| + |e_2\rangle\langle e_1|$.

Problema 5.8

Mostre que, para qualquer matriz diagonal, seus autovalores são os elementos de sua diagonal.

Problema 5.9

Verifique diretamente que os autovetores da seguinte matriz

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 1 & a \end{pmatrix},$$

com $a \in \mathbb{R}$, não são base para o espaço $M_{2\times 1}$.

Problema 5.10

Considere uma matriz Hermitiana 2×2 geral e mostre diretamente que seus autovetores são base para o espaço dos vetores coluna 2×1.

Teorema 5.4 Teorema espectral (versão para dimensão finita)

Seja V um espaço vetorial de dimensão N e $A : V \to V$ um operador Hermitiano. O conjunto de autovetores de A forma uma base para V.

A demonstração detalhada do teorema acima é simples para o caso em que não há degenerescência, isto é, quando o número de autovalores distintos de A é a dimensão do espaço. Essa demonstração é feita a seguir.

Demonstração: Num espaço vetorial V de dimensão N, A possui no máximo N autovalores distintos (a equação característica que determina os autovalores é neste caso uma equação de grau N, logo ela possui no máximo N raízes distintas). Caso A possua N autovalores distintos, pelo teorema dos autovetores de operador Hermitiano, seus autovetores serão todos ortogonais entre si. Concluímos que se A tiver N autovalores diferentes, seus autovetores constituirão uma base para V.$\blacksquare$

Quando há degenerescência, ou seja, quando o número de autovalores distintos de A é inferior a N, a estratégia é subdividir espaço original em subespaços V_k, com $k = 1, 2, ..., m$. Cada subespaço V_k é gerado pelos autovetores de A associados a um mesmo autovalor λ_k. Por exemplo, se $|u_1\rangle$ e $|u_2\rangle$ estão associados a um mesmo autovalor λ_1, ambos seriam elementos de V_1, que é o espaço gerado pelos autovetores de A cujo autovalor é λ_1. Por fim, prova-se que $\dim V = \sum_{k=1}^{m} \dim V_k$, ou seja, que o número total de autovetores independentes de A é o mesmo do espaço original. Fazer em detalhes a demonstração acima é trabalhoso, pois requer uma série de pequenos resultados. Isso é feito em detalhes, por exemplo, no livro do Hassani, aonde há um capítulo só sobre este teorema.

A versão acima do teorema espectral é somente para dimensão finita. O objeto desta abordagem no nosso curso é conseguir entendê-lo num caso simples. Em mecânica quântica, a versão para dimensão infinita é também importante, mas a demonstração neste caso envolve mais considerações que estão além do propósito de nosso curso. Maiores desenvolvimentos do teorema espectral serão vistos no curso de mecânica quântica. Veremos ainda neste curso outras aplicações, independentes da mecânica quântica.

Parte II

Análise de Fourier e delta de Dirac

Parte III

Análise complexa e aplicações para equações diferenciais

Bibliography

[1] Vanilse S. Araujo, F. A. B. Coutinho, and J. Fernando Perez. Operator domains and self-adjoint operators. *American Journal of Physics*, 72(2):203–213, 02 2004.