



**UNIVERSIDADE DA INTEGRAÇÃO INTERNACIONAL DA LUSOFONIA
AFRO-BRASILEIRA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA - ICEN
CURSO DE GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

ANTÔNIO ROMÁRIO DO NASCIMENTO LIMA

**FORMALISMO DO OPERADOR TRANSLAÇÃO DEPENDENTE DA POSIÇÃO:
FORÇAS DE ORIGEM GEOMÉTRICAS NA MECÂNICA QUÂNTICA**

ACARAPE

2022

ANTÔNIO ROMÁRIO DO NASCIMENTO LIMA

FORMALISMO DO OPERADOR TRANSLAÇÃO DEPENDENTE DA POSIÇÃO: FORÇAS
DE ORIGEM GEOMÉTRICAS NA MECÂNICA QUÂNTICA

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas e da Natureza - ICEN da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, como requisito parcial à obtenção do grau de Licenciatura em Física.

Orientador: Prof. Dr. João Philipe Macedo Braga

ACARAPE

2022

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira
Sistema de Bibliotecas da UNILAB
Catalogação de Publicação na Fonte.

Lima, Antônio Romário do Nascimento.

L732f

Formalismo do operador translação dependente da posição: forças de origem geométricas na mecânica quântica / Antônio Romário do Nascimento Lima. - Redenção, 2022.
92f: il.

Monografia - Curso de Física, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Redenção, 2022.

Orientador: Prof. Dr. João Philipe Macedo Braga.

1. Mecânica Quântica. 2. Operador de Translação. 3. Forças Geométricas. I. Título

CE/UF/BSCA

CDD 530.15

ANTÔNIO ROMÁRIO DO NASCIMENTO LIMA

FORMALISMO DO OPERADOR TRANSLAÇÃO DEPENDENTE DA POSIÇÃO: FORÇAS
DE ORIGEM GEOMÉTRICA NA MECÂNICA QUÂNTICA

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas e da Natureza - ICEN da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, como requisito parcial à obtenção do grau de Licenciatura em Física.

Aprovada em:

BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. João Philipe Macedo Braga (Orientador)
Universidade da Integração Internacional da
Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)

VANDERLEY AGUIAR DE LIMA JÚNIOR ::

Prof. Dr. Vanderley Aguiar de Lima Júnior
Universidade Federal do Ceará (UFC)



Prof. Ms. Antônio Isael Paz Pires
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Dedico este TCC primeiramente à Deus e à Santíssima Virgem Maria, por todas as graças à mim concedidas. Também à minha família, em especial meu pai e tio Antônio Valdênio, que sempre me apoiaram. Ao meu amigo e irmão, Peter Stephen, que me ajudou nesta batalha.

AGRADECIMENTOS

É impossível escrever estes agradecimentos sem cometer qualquer tipo de injustiça, já que foram muitos os que fizeram parte desta linda e grande trajetória que me trouxe até aqui. Começo, portanto, agradecendo a Deus e a Santíssima Virgem Maria, que mesmo em minhas misérias, me ajudaram e me deram forças para não desistir, que estiveram comigo mesmo nos piores momentos.

Agradeço à toda minha família; aos meus pais que de alguma forma sempre procuraram me ajudar, em especial meu pai Antônio de Oliveira Lima. Agradeço aos meus irmãos, meus avós e tios, no qual de alguma forma sempre torceram por mim. Também agradeço ao meu bisavô, Valdemiro de Souza Belo e ao meu tio Antônio Valdênio, no qual os perdi neste trajeto, mas que sempre os guardo em minhas memórias.

Agradeço ao meu professor e orientador Dr. João Philipe, que me ensinou um novo jeito de enxergar a Física, pela suas aulas incríveis e de grandes debates, e também, pela disponibilidade que sempre teve em me ajudar. Aos professores Dr. Rodrigo e Dr. Wesley pelas excelentes aulas de matemática, as melhores que já tive. Ao GEPPAA, pelas inúmeras boas experiências que me proporcionaram, e também ao prezado Welisson Pires, pelo apoio no início do curso. Também agradeço aos professores Dr. Aristeu, Dra. Sílvia e o Dr. Levi, pelas excelentes aulas de Física e pelo apoio nas avaliações. Agradeço também a todos os professores, que de alguma forma colaboraram com a minha formação. Agradeço também ao estimado colega, Abmael Rodrigues, que me ajudou bastante com a plataforma *Latex*. Por fim, agradeço ao meu amigo e estimado irmão de batalha, Peter Stephen Frota Willians, que com sua amizade e apoio me ajudou muito nesta minha caminhada; agradeço muito pelos inúmeros incentivos que me fez para que eu realizasse meu sonho de fazer mestrado e doutorado, pela colaboração na elaboração de trabalhos científicos e relatórios e pela amizade incondicional.

"Mesmo desacreditado e ignorado por todos, não posso desistir, pois para mim, vencer é nunca desistir."

(Albert Einstein)

RESUMO

Neste trabalho, apresentamos inicialmente o formalismo matemático da mecânica quântica desenvolvida por Paul Dirac. Neste formalismo, usamos a notação de bras e de kets, no qual os estados quânticos de um sistema, podem agora ser representados por vetores de estado, que para este formalismo correspondem aos kets, que pertencem a um espaço vetorial complexo e abstrato, chamado de espaço dos estados. Nesta abordagem matemática, os kets são vetores de estado não nulos, que contêm todas as informações possíveis acerca do sistema. No formalismo de Dirac, os observáveis físicos são representados por operadores hermitianos, no qual os autovalores correspondem aos possíveis resultados da medida destes observáveis. No espaço euclidiano, uma translação infinitesimal espacial dx , leva a partícula do estado $|x\rangle$ para o estado $|x + dx\rangle$, no entanto, ao estudarmos o formalismo do operador translação dependente da posição, notamos que uma translação espacial infinitesimal em um espaço não-euclidiano, não levaria necessariamente a partícula do estado $|x\rangle$ para o estado $|x + dx\rangle$; tudo isso porque, mudou-se a métrica deste espaço. Diante disso, ao associarmos um peso ao espaço de Hilbert, devido justamente generalizarmos nosso espaço à espaços curvos, foi possível redefinir o operador identidade; também foi redefinido o operador translação e até mesmo a equação do tipo Schrödinger se apresentou de uma nova forma. Além disso, foi possível generalizar o Teorema de Ehrenfest, considerando a nova métrica do espaço; a partir disso, estudamos a equação de movimento de uma partícula num espaço deformado. Para isso, associamos uma expansão de Taylor a métrica espacial, derivamos as equações canônicas de Hamilton e verificamos que a equação semelhante à segunda lei de Newton, possuía termos extras com dimensão de força, que por sua vez, foram interpretadas como sendo forças de origem puramente geométricas, devido a métrica do espaço.

Palavras-chave: Mecânica Quântica. Operador de Translação. Forças Geométricas.

ABSTRACT

In this work, we initially present the mathematical formalism of quantum mechanics developed by Paul Dirac. In this formalism, we use the notation of bras and kets, in which the quantum states of a system can now be represented by state vectors, which for this formalism correspond to kets, which belong to a complex and abstract vector space, called a states space. In this mathematical approach, kets are non-zero state vectors, which contain all possible information about the system. In Dirac's formalism, the physical observables are represented by Hermitian operators, in which the eigenvalues correspond to the possible results of the measurement of these observables. In Euclidean space, an infinitesimal spatial translation dx , takes the particle from the state $|x\rangle$ to the state $|x + dx\rangle$, however, when studying the formalism of the position-dependent translation operator, we notice that an infinitesimal spatial translation in a non-Euclidean space would not necessarily take the particle from the state $|x\rangle$ to the state $|x + dx\rangle$; all this because the metric of this space has changed. Therefore, when we associate a weight to the Hilbert space, precisely because we generalize our space to curved spaces, it was possible to redefine the identity operator; the translation operator was also redefined and even the Schrödinger equation presented itself in a new way. Furthermore, it was possible to generalize Ehrenfest's Theorem, considering the new space metric; from there, we study the equation of motion of a particle in a deformed space. For this, we associated a Taylor expansion to the spatial metric, derived Hamilton's canonical equations and verified that the equation similar to Newton's second law, had extra terms with force dimension, which in turn, were interpreted as forces of origin. purely geometric, due to the metric of space.

Keywords: Quantum Mechanics. Translation Operator. Geometric Forces.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Ilustração de como era o aparato de Stern Gerlach	14
Figura 2 – Fotografia datada em 8/2/1922 e enviada por Walther Gerlach a Niels Bohr, com a mensagem: "Prova experimental da quantização direcional. Meus parabéns pela confirmação da sua teoria."	16
Figura 3 – Sequências de aparatos SG	17

LISTA DE SÍMBOLOS

$ \alpha\rangle$	Ket
$\langle\alpha $	Bra
\hat{X}	Operador X
Σ	Somatório
\hbar	Constante Reduzida de Planck
$\hat{\Lambda}$	Operador de Projeção
$\langle A \rangle$	Valor Esperado de A
σ	Desvio Padrão
$\hat{\mathcal{S}}(dx)$	Operador Traslação
δ	Delta de Dirac ou de Kronecker
$\psi(x_i)$	Função de Onda no Espaço das Posições
$\Phi(p_i)$	Função de Onda no Espaço dos Momentos
∇	Operador Nabla
$\hat{\mathcal{U}}$	Operador de Evolução Temporal
$\prod_{j=i}^n$	Produtório
\hat{H}_g	Hamiltoniano Generalizado
\mathcal{L}	Lagrangiana

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
2	FORMALISMO MATEMÁTICO DE DIRAC PARA ESPECTROS DIS- CRETOS	14
2.1	Experimento de Stern-Gerlach	14
2.1.1	<i>Experimento de Stern-Gerlach Sequenciais</i>	17
2.2	Espaço dos Kets	17
2.2.0.1	<i>Propriedades do Espaço dos Estados</i>	18
2.3	Espaço dos Bras	20
2.4	Produto Interno	21
2.5	Operadores	22
2.6	Produto Externo	23
2.7	Autovalores de um Observável	24
2.8	Autovetores como Kets de Base	26
2.9	Representações Matriciais	27
2.9.1	<i>Operador Adjunto Hermitiano</i>	29
2.9.2	<i>Matrizes Explícitas</i>	31
2.9.2.1	<i>Exemplo do Sistema de Spin 1/2</i>	33
2.10	Medidas	34
2.10.1	<i>Sistema de Spin 1/2</i>	36
2.11	Observáveis Compatíveis e Incompatíveis	38
2.12	Relação de Incerteza	41
2.13	Mudança de Base	45
2.13.1	<i>Operador de Transformação</i>	45
2.13.2	<i>Matriz de Transformação</i>	46
2.13.3	<i>Diagonalização</i>	47
3	FORMALISMO MATEMÁTICO DE DIRAC PARA ESPECTROS CON- TÍNUOS	49
3.1	Autokets e Medidas de Posição	50
3.2	Operador Translação	51
3.2.1	<i>Momento como Gerador de Translações</i>	54

3.2.2	<i>Operador de Translação para Translações Finitas</i>	55
3.3	Função de Onda no Espaço das Posições	56
3.3.1	<i>Operador Momento na Base de Autovetores de Posição</i>	58
3.4	Função de Onda no Espaço dos Momentos	59
3.5	Generalização para o Espaço Tridimensional	61
3.6	Evolução Temporal e a Equação de Schrödinger	63
3.6.1	<i>Operador Evolução Temporal</i>	63
3.6.2	<i>Equação de Schrödinger</i>	65
3.6.3	<i>Autokets de Energia</i>	66
3.6.4	<i>Dependência Temporal dos Valores Esperados</i>	68
4	FORMALISMO DO OPERADOR DE TRANSLAÇÃO DEPENDENTE DA POSIÇÃO	69
4.1	Formalismo PDTO Unidimensional	69
4.2	Consequências Físicas do Formalismo PDTO	76
4.2.1	<i>Determinismo da Evolução Temporal</i>	77
4.2.2	<i>Conservação da Probabilidade</i>	78
4.2.3	<i>Teorema de Ehrenfest Generalizado</i>	80
4.2.3.1	<i>Mecânica Clássica em um Espaço Deformado</i>	82
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	86
	REFERÊNCIAS	88
	APÊNDICES	90
	APÊNDICE A – Demonstrações Matemáticas	90

1 INTRODUÇÃO

A mecânica quântica é a teoria física que se preocupa em estudar os sistemas físicos cuja dimensões são bem próximas ou até mesmo abaixo da escala atômica [1, 2, 3], ou seja, a teoria quântica é fundamental para estudar os sistemas microscópicos [4, 5, 6]. No entanto, para os valores médios dos observáveis físicos, a mecânica clássica apresenta-se ser apenas um caso particular da mecânica quântica [7, 8, 6].

A mecânica quântica, possui até então, pelo menos nove formulações distintas[9], que abrange as formulações de Richard Feynman, Werner Heisenberg, Erwin Schrödinger, entre outras. A formulação em destaque neste trabalho, consiste na formulação desenvolvida por Paul Dirac, abordada e discutida por J.J. Sakurai [4], no qual o seu livro é um dos principais textos de base para este trabalho. A representação de Dirac da mecânica quântica é uma intermediação entre as formulações de Heisenberg e Schrödinger, no qual nesta abordagem, o estado de uma partícula em um instante de tempo t_0 , é descrito matematicamente por um ket de estado $|\psi(t_0)\rangle$, pertencente ao espaço dos estados \mathcal{E} , cujo a evolução temporal do sistema, é governado pela equação de Schrödinger[6]. Notemos que o espaço dos estados \mathcal{E} , e o espaço das funções de ondas, o espaço de Hilbert¹ \mathcal{H} , são isomórficos. Na realidade, o espaço dos estados é um subespaço do espaço de Hilbert[1]. Os observáveis físicos, no formalismo matemático de Dirac, agora são representados por operadores hermitianos que atuam nos kets de estado resultando sempre em outro ket pertencente ao espaço considerado. Os operadores possuem autovetores que formam uma determinada base para o espaço dos estados e os únicos resultados possíveis ao se realizar a medida desse observável, são os autovalores deste operador [6].

Uma das primeiras pretensões deste trabalho, é discutir o formalismo matemático desenvolvido por Dirac para espectros discretos. Deste modo, a partir do experimento de Stern-Gerlach, buscar-se-á definir alguns conceitos fundamentais como por exemplo, o conceito de kets, bras, operadores, entre outros conceitos. Para tal, este trabalho estabelecerá como critério de desenvolvimento, os mesmos passos estabelecidos por J.J.Sakurai [4], para deste modo, apresentar o formalismo. Em seguida, o capítulo seguinte busca generalizar todo este formalismo para o caso de espectros contínuos, no qual será discutido com detalhes o operador de translação e o conceito de função de onda, tanto para o espaço das posições quanto para o espaço dos momentos.

¹ Tecnicamente, o espaço das funções de onda, é apenas um exemplo de um espaço de Hilbert. A rigor, o espaço de Hilbert é todo e qualquer espaço com produto interno completo[8].

Quando trabalhamos com a teoria quântica no espaço euclidiano, uma translação espacial infinitesimal dx , leva uma partícula do estado $|x\rangle$ para o estado $|x + dx\rangle$. A partir disso, é definido o operador de translação espacial em termos do operador momento, no qual o momento é o gerador de translação e conseqüentemente, é encontrado uma relação de comutação entre alguns operadores, como o de posição e momento por exemplo[10]. No entanto, quando realizamos uma translação infinitesimal espacial dx em um espaço não-euclidiano, a partícula agora não necessariamente sai do estado $|x\rangle$ para o estado $|x + dx\rangle$; agora em um espaço curvo por exemplo, é necessário uma translação de comprimento ds para levar uma partícula do estado $|x\rangle$ para o estado $|x + dx\rangle$ [6]. Essa diferença ocorre devido ao fato de que ao mudar a geometria do espaço, mudou-se também a sua métrica.

No sentido de analisar quais os efeitos da mudança da métrica espacial na teoria quântica, este trabalho apresenta brevemente para o caso unidimensional o estudo do formalismo do operador translação dependente da posição (*Position Dependent Translation Operator -PDTO*), que por sua vez, também recebe o nome de mecânica quântica não-aditiva[6], no entanto, a última nomenclatura não é muito utilizada ultimamente. Neste formalismo, o espaço de Hilbert é dotado de um peso associado a métrica do espaço e a partir disso, ao generalizar o operador identidade, um ket arbitrário, outras generalizações foram feitas como consequência. Ao introduzirem o conceito de deslocamento espacial não-aditivo, o trabalho de R. N. Costa Filho *et al.*[11], implicou na obtenção de uma nova relação de comutação entre o operador momento e o operador posição, além de uma equação do tipo Schrödinger modificada e generalizada[6], no qual para um caso particular em que a função da métrica espacial é constante e unitária, recai à equação de Schrödinger tradicional encontrada nos principais livros de graduação[1, 4, 8]. Em seguida, para concretizar o estudo do formalismo PDTO, generalizamos o teorema de Ehrenfest, e estudamos as equações de movimento de uma partícula clássica em um espaço deformado. Notamos que ao associarmos uma série de Taylor a métrica e derivarmos as equações canônicas de Hamilton, a equação semelhante à segunda lei de Newton, possuía termos extras com dimensões de força, que *a priori*, podem ser interpretadas como sendo forças não-inercias. No entanto, vale ressaltar que, em nenhum momento foi realizado nenhuma mudança de referencial, no qual foi identificado um referencial acelerado em relação a um referencial inercial, portanto, como a origem destes termos é devido a presença da métrica do espaço não-euclidiano, estes termos podem ser interpretados também como sendo forças de origem geométricas.

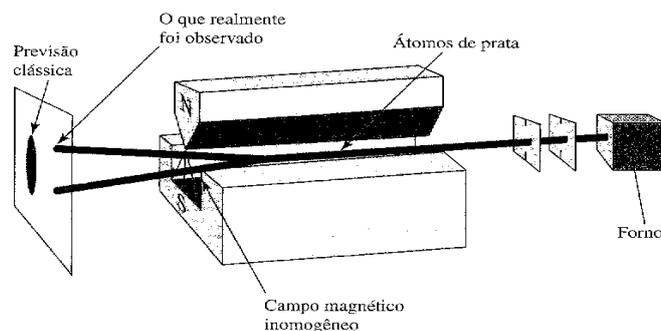
2 FORMALISMO MATEMÁTICO DE DIRAC PARA ESPECTROS DISCRETOS

O comum nos cursos de graduação é iniciar o estudo da mecânica quântica a partir de uma abordagem histórica[4], no qual se incia com o estudo da radiação do corpo negro, o átomo de Bohr, a dualidade de onda-partícula e assim por diante[12]. No entanto, com o intuito de forçar ao máximo a se abandonar as impressões clássicas, iniciamos este trabalho já com o experimento de Stern-Gerlach, no qual se nota que é impossível descrever-lo precisamente a partir de interpretações isoladas da mecânica clássica. A partir então, da análise do experimento, nota-se a necessidade de se considerar em trabalhar com espaços vetoriais complexos. Diante de tal necessidade, surge então a notação de bras e de kets, desenvolvida por Dirac[7]. Notamos ainda, que os conceitos de matrizes, espaços vetoriais, bases, são amplamente utilizados. Deste modo, constatamos de imediato, que uma das linguagens da mecânica quântica é a álgebra linear[8].

2.1 Experimento de Stern-Gerlach

Em 1922 os físicos alemães Otto Stern e Walther Gerlach realizaram um experimento cujo objetivo era verificar a quantização do momento angular[13], ou seja, verificar que o átomo possuía um momento angular intrínseco, que por sua vez, era quantizado. Nesta época, Stern era um assistente de Max Born no Instituto de Física Teórica da Universidade de Frankfurt, e Gerlach era um assistente da mesma Universidade no Instituto de Física Experimental. A Figura 1, ilustra o aparato experimental usado pelos físicos, no qual consiste de um forno onde são aquecidos átomos de prata, alguns colimadores por onde passa um feixe, um par de polos com aresta irregular e uma placa detectora.

Figura 1 – Ilustração de como era o aparato de Stern Gerlach



Fonte: Sakurai, 2013 [4]

Será apresentado agora uma breve descrição e discussão acerca do experimento de Stern-Gerlach, no qual, caso houver o interesse em um aprofundamento, French e Taylor realizam uma discussão elementar e mais esclarecedora[14]. Inicialmente, os átomos de prata(Ag) são aquecidos em um forno, que por sua vez, possui um pequeno orifício pelo qual, com o aumento da temperatura, permite que alguns átomos escapem. O feixe passa por um colimador e é submetido à ação de um campo magnético não uniforme produzido por um par de polos, com aresta irregular como mostra a Figura 1. Algumas propriedades valem apenas ser destacadas: 1-A distribuição de velocidade dos átomos de prata é determinada pela temperatura do forno, 2- Os colimadores direcionam horizontalmente a velocidade das partículas; 3- Ao passar pela região de gradiente do campo magnético, os átomos são defletidos de acordo com o valor da componente z do momento magnético, μ_z .

Os átomos de prata possuem um núcleo atômico de 47 elétrons, com a seguinte distribuição eletrônica:

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^1 4d^{10},$$

no qual 46 desses elétrons podem ser interpretados como formando uma nuvem eletrônica esférica, de tal modo que o momento angular resultante é zero[4]. O átomo pesado, possui como um todo, um momento magnético proporcional ao momento magnético de spin do 47º elétron(5s). Deste modo, existe uma relação entre o momento de dipolo do átomo e o spin do elétron, que é dado por

$$\vec{\mu} = \frac{e}{m_e c} \vec{S}. \quad (2.1)$$

A energia potencial magnética V_B que as partículas vão apresentar ao passarem pela região de gradiente do campo magnético é dada por

$$V_B = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (2.2)$$

Sendo \vec{F}_B a força de origem magnética vinculada a V_B , temos,

$$\vec{F}_B = -\left(\frac{\partial V_B}{\partial x} \hat{x} + \frac{\partial V_B}{\partial y} \hat{y} + \frac{\partial V_B}{\partial z} \hat{z} \right). \quad (2.3)$$

Sem perda de generalidade, vamos considerar que na região onde as partículas estão passando, o campo magnético está orientado exclusivamente na direção de \hat{z} , logo obtemos,

$$F_z = -\frac{\partial V_z}{\partial z} = -\frac{\partial}{\partial z} (-\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \frac{\partial}{\partial z} (\mu_z B_z). \quad (2.4)$$

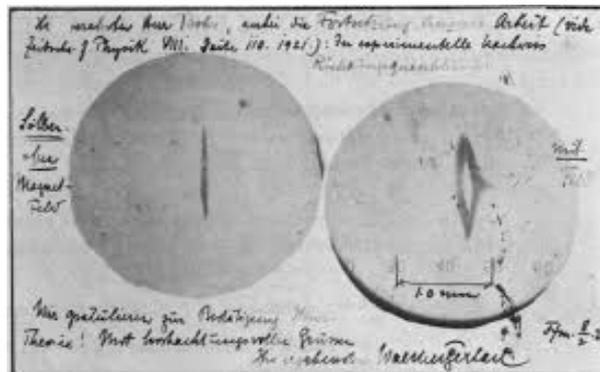
Como μ_z é constante, temos

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}. \quad (2.5)$$

Pode-se facilmente notar, que não nos interessa a intensidade do campo, mas sim, a sua variação. Por isso, o campo magnético é inhomogêneo. Notemos ainda, que uma vez que o átomo como todo é muito massivo, é de se esperar que o conceito de trajetória possa ser legitimamente aplicado[4]. Então, ao passarem pela região magnetizada, a trajetória dos átomos de prata sofre uma deflexão de acordo com μ_z . Deste modo, se $\mu_z > 0$ (significa que $S_z < 0$), então $F_z > 0$. Agora se $\mu_z < 0$ (isto significa que $S_z > 0$), então $F_z < 0$.

Portanto, pelo aparato de SG (Stern-Gerlach), é possível "medir" a componente z de \vec{S} a menos de uma constante de proporcionalidade, ou que é equivalente, a componente z de $\vec{\mu}$. Ao saírem do forno, os átomos estão orientados aleatoriamente. Se um elétron fosse semelhante a um objeto clássico que gira sobre seu próprio eixo, esperaríamos obter valores de μ_z contínuos[4]. No entanto, o aparato de SG separa os átomos em duas componentes distintas, de tal modo que observa-se que somente dois valores de componente z de \vec{S} são possíveis: S_z para cima (Up) e S_z para baixo (Down), que será denotado por S_{z+} e S_{z-} . Esses dois possíveis valores de S_z , são múltiplos de alguma unidade fundamental de momento angular. Portanto, a quantização do momento angular de spin do elétron, é o primeiro grande resultado obtido a partir do experimento de Stern-Gerlach[4, 14]. Os resultados são apresentados desta vez acompanhados por uma foto (Figura 2), no qual aparece a prata depositada na placa de vidro após uma revelação fotográfica. Na esquerda da imagem temos o caso em que o campo é zero, já a direita, com um campo magnético não nulo.

Figura 2 – Fotografia datada em 8/2/1922 e enviada por Walther Gerlach a Niels Bohr, com a mensagem: "Prova experimental da quantização direcional. Meus parabéns pela confirmação da sua teoria."

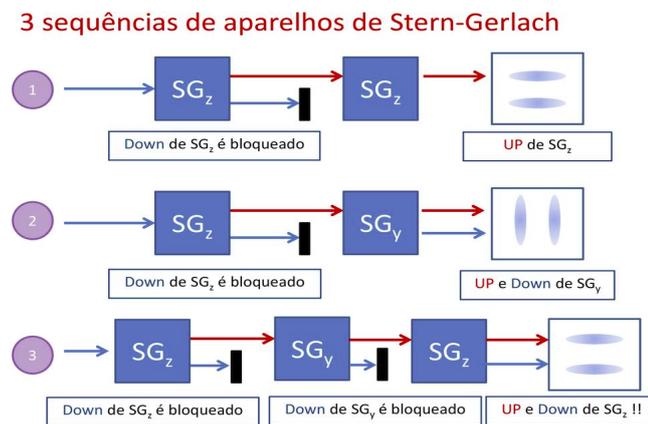


Fonte: B. Friedrich and H. Dudley, 2003 [13]

2.1.1 Experimento de Stern-Gerlach Sequenciais

Para verificar um segundo resultado importante, consideremos que o feixe atômico passe por dois ou mais aparatos SG em sequência, como ilustra a Figura 3.

Figura 3 – Sequências de aparatos SG



Fonte: SlidePlayer, 2017 [15]

Consideremos ainda, o terceiro caso da Figura 3. Podemos notar que o feixe que sai do forno, passa por um aparato do tipo $SG_{\hat{z}}$, que representa um aparato com um campo magnético inhomôneo apontado para a direção \hat{z} , e dele emerge as componentes S_{z+} e S_{z-} . Em seguida, bloqueia-se a componente S_{z-} , e submete-se apenas o feixe S_{z+} a um outro aparato $SG_{\hat{y}}$. O que se nota então, é que o feixe S_{z+} possui duas componentes, S_{y+} e S_{y-} . Agora, se faz novamente um processo de filtração e bloqueia-se apenas a componente S_{y-} , permitindo que se passe apenas a componente S_{y+} . Ao passar perante a um novo aparato $SG_{\hat{z}}$, surpreendentemente, nota-se que ao invés de emergir apenas a componente S_{z+} , emerge também a outra componente S_{z-} . Desta constatação, surge então o segundo grande resultado do experimento de Stern-Gerlach, na mecânica quântica, não se pode determinar S_z e S_y simultaneamente[4].

2.2 Espaço dos Kets

Na mecânica quântica um estado físico é representado por um vetor de estado em um espaço vetorial complexo, o espaço dos estados[6], no qual a dimensão do espaço é determinada de acordo com o sistema físico em que se é considerado[4]. Este vetor de estado será chamado de ket e representado por $|\alpha\rangle$ [1]. Toma-se como postulado que tudo o que quisermos perguntar a respeito do estado, a informação encontra-se contida no ket, ou seja, o ket contém toda

informação acerca do estado físico[4, 8].

2.2.0.1 Propriedades do Espaço dos Estados

Seja \mathcal{E} um espaço vetorial abstrato sobre o corpo \mathbb{C} , munido de um produto interno, no qual $|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle, |\alpha_3\rangle, \dots \in \mathcal{E}$, este espaço vetorial é munido de algumas propriedades. Seguem elas:

1- Se $|\alpha_1\rangle$ e $|\alpha_2\rangle \in \mathcal{E}$, então

$$|\alpha_1\rangle + |\alpha_2\rangle = |\alpha_3\rangle \in \mathcal{E}. \quad (2.6)$$

Ou seja, a propriedade diz que a soma de dois kets pertencentes ao espaço \mathcal{E} , gera um outro ket que também pertence ao mesmo espaço.

2- No espaço dos kets a soma é comutativa. Logo,

$$|\alpha_1\rangle + |\alpha_2\rangle = |\alpha_2\rangle + |\alpha_1\rangle. \quad (2.7)$$

3- No espaço dos kets a soma é distributiva. Logo,

$$(|\alpha_1\rangle + |\alpha_2\rangle) + |\alpha_3\rangle = |\alpha_1\rangle + (|\alpha_2\rangle + |\alpha_3\rangle). \quad (2.8)$$

4- O espaço dos kets contém o vetor nulo. Logo,

$$0 + |\alpha_1\rangle = |\alpha_1\rangle. \quad (2.9)$$

5- O espaço dos kets contém um ket anti-simétrico. Logo, se

$$|\alpha_1\rangle + |-\alpha_1\rangle = 0 \Rightarrow |-\alpha_1\rangle = -|\alpha_1\rangle. \quad (2.10)$$

6- Um escalar multiplicado por um ket pertencente ao espaço \mathcal{E} , gera um ket pertencente ao mesmo espaço. Deste modo, seja $k \in \mathbb{C}$, se

$$|\alpha_1\rangle \in \mathcal{E} \Rightarrow k|\alpha_1\rangle \in \mathcal{E}. \quad (2.11)$$

7- No espaço dos kets, o produto de um escalar com a soma de dois ou mais kets, tal operação é tida como sendo distributiva. Deste modo, para $k \in \mathbb{C}$, temos

$$k(|\alpha_1\rangle + |\alpha_2\rangle) = k|\alpha_1\rangle + k|\alpha_2\rangle. \quad (2.12)$$

Na mecânica quântica há alguns postulados fundamentais. Segue então um importante postulado:

Postulado 1 Na mecânica quântica, $\forall k \neq 0$, com a prerrogativa que $k \in \mathbb{C}$, o estado $|\alpha\rangle$ e $k|\alpha\rangle$ correspondem ao mesmo estado físico.

Um observável, tal como o momento, posição, ou componentes de Spin, na mecânica quântica pode ser representado por um operador[4, 16]. De modo geral, um operador atua sobre um ket pela esquerda. Portanto,

$$\hat{A} \cdot (|\alpha\rangle) = \hat{A}|\alpha\rangle. \quad (2.13)$$

Deste modo, quando um operador atua num ket pela esquerda, o resultado desta operação também é um ket. Existem ainda, kets específicos denominados autovetores de um operador \hat{A} e denotamos por

$$|a_1\rangle, |a_2\rangle, |a_3\rangle, \dots, \quad (2.14)$$

que contêm a seguinte propriedade:

$$\hat{A}|a_1\rangle = a_1|a_1\rangle,$$

$$\hat{A}|a_2\rangle = a_2|a_2\rangle, \quad (2.15)$$

$$\hat{A}|a_3\rangle = a_3|a_3\rangle,$$

⋮

no qual $a_1, a_2, a_3 \in \mathbb{C}$. Ao aplicar o operador sobre o autovetor, reproduzimos o mesmo ket a menos de um fator multiplicativo[4, 17]. O conjunto dos números $\{a_1, a_2, a_3, \dots\}$, é chamado de autovalores do operador \hat{A} .

O estado físico que corresponde a um autovetor é chamado de autoestado. No caso de sistema de Spin $\frac{1}{2}$ a relação autovetor-autoestado é:

$$\hat{S}_z|S_z+\rangle = \frac{\hbar}{2}|S_z+\rangle, \quad (2.16)$$

$$\hat{S}_z|S_z-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|S_z-\rangle. \quad (2.17)$$

Os autokets do operador \hat{A} , $\{|a_i\rangle\}$, formam uma base completa e podem ser utilizados para descrever qualquer estado $|\alpha\rangle$,

$$|\alpha\rangle = \sum_{a_i} C_{a_i} |a_i\rangle, \quad (2.18)$$

no qual C_{a_i} é um coeficiente complexo.

2.3 Espaço dos Bras

O espaço dos Bras \mathcal{E}^* , é um espaço vetorial complexo e abstrato que é "dual" ao espaço dos kets[8], e ele pode ser entendido como uma imagem especular deste mesmo espaço[4]. Em geral, o espaço dual \mathcal{E}^* , e o espaço dos estados \mathcal{E} , não são isomórficos, exceto em casos em que \mathcal{E} tem dimensão finita[1]. Segue então um importante postulado para o espaço dual \mathcal{E}^* :

Postulado 2 *Para cada ket $|\alpha\rangle$, existe um bra correspondente denotado por $\langle\alpha|$, pertencente ao espaço dual dos bras.*

O espaço dos bras é gerado por autovetores $\{\langle\alpha_1|, \langle\alpha_2|, \langle\alpha_3|, \dots\}$ que correspondem aos autovetores $\{|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle, |\alpha_3\rangle, \dots\}$. Portanto, existe uma correspondência unívoca entre os espaços:

$$|\alpha\rangle \longleftrightarrow \langle\alpha|, \quad (2.19)$$

$$|a_1\rangle, |a_2\rangle, |a_3\rangle, \dots \longleftrightarrow \langle a_1|, \langle a_2|, \langle a_3|, \dots, \quad (2.20)$$

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle \longleftrightarrow \langle\alpha| + \langle\beta|. \quad (2.21)$$

É importante ressaltar que, embora cada ket $|\alpha\rangle$ de \mathcal{E} , possua um correspondente dual $\langle\alpha|$ em \mathcal{E}^* , o inverso não é verdadeiro[1].

Postulado 3 *Seja $c \in \mathbb{C}$, para cada $|\alpha\rangle$, existe um bra correspondente² $\langle\alpha|$, tal que*

$$c|\alpha\rangle \longleftrightarrow c^* \langle\alpha|, \quad (2.22)$$

$$c_\alpha |\alpha\rangle + c_\beta |\beta\rangle \longleftrightarrow c_\alpha^* \langle\alpha| + c_\beta^* \langle\beta|. \quad (2.23)$$

² Ao usarmos o símbolo \longleftrightarrow , estamos querendo dizer que há uma correspondência unívoca entre o espaço \mathcal{E} e \mathcal{E}^* , ou seja, um ket de \mathcal{E} , é correspondente dual de um bra \mathcal{E}^* .

2.4 Produto Interno

O produto interno entre um bra e um ket é representado por um bra à esquerda e um ket à direita. Deste modo, temos

$$[(\langle\beta|) \cdot (|\alpha\rangle)] = \langle\beta|\alpha\rangle. \quad (2.24)$$

Ao fazermos um produto interno, sempre tomamos um vetor do espaço dos bras e um outro do espaço dos kets. Note-se ainda, que $\langle\beta|\alpha\rangle$ e $\langle\alpha|\beta\rangle^*$ são os complexos conjugados um do outro[4]. Deste modo,

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*. \quad (2.25)$$

O produto interno $\langle\alpha|\alpha\rangle$, é sempre um número real não negativo. Logo,

$$\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0, \quad (2.26)$$

no qual a equação (2.26) é muita das vezes conhecida como o postulado da **métrica positiva definida**[4]. Notaremos mais a frente que esse postulado é fundamental para a interpretação probabilística da mecânica quântica. Dizemos ainda que, dado dois kets $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$, eles são ditos ortogonais, se

$$\langle\alpha|\beta\rangle = 0. \quad (2.27)$$

Já a relação de ortogonalidade implica via equação (2.25), que

$$\langle\beta|\alpha\rangle = 0. \quad (2.28)$$

Agora, dado um ket não nulo, podemos construir o ket normalizado $|\tilde{\alpha}\rangle$, no qual

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}} \right) |\alpha\rangle, \quad (2.29)$$

tal que

$$\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\alpha}\rangle = 1, \quad (2.30)$$

cujo o fator $\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}$ é conhecido como a norma de $|\alpha\rangle$.

2.5 Operadores

Como dito anteriormente, observáveis como momento, posição e componentes de spin, são representados por operadores que atuam sobre os kets. Um operador qualquer atuando em um ket pelo lado esquerdo,

$$\hat{X}(|\alpha\rangle) = \hat{X}|\alpha\rangle, \quad (2.31)$$

o resultado desta operação gera sempre um outro ket. Temos ainda que, dois operadores são ditos equivalentes, ou seja,

$$\hat{X} = \hat{Y}, \quad (2.32)$$

se

$$\hat{X}|\alpha\rangle = \hat{Y}|\alpha\rangle. \quad (2.33)$$

O operador \hat{X} é dito nulo se para qualquer ket arbitrário, temos

$$\hat{X}|\alpha\rangle = 0. \quad (2.34)$$

Realizar determinadas operações com estes operadores será de grande utilidade para o formalismo proposto por Dirac. Deste modo, é importante saber de quais propriedades estes operadores são munidos. Inicialmente temos que as operações de adição são comutativas,

$$\hat{X} + \hat{Y} = \hat{Y} + \hat{X}, \quad (2.35)$$

e associativas

$$(\hat{X} + \hat{Y}) + \hat{Z} = \hat{X} + (\hat{Y} + \hat{Z}). \quad (2.36)$$

Outra propriedade importante, é que esses operadores geralmente são lineares, mesmo não sendo uma exigência[4]. Logo,

$$\hat{X}(c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle) = c_\alpha\hat{X}|\alpha\rangle + c_\beta\hat{X}|\beta\rangle. \quad (2.37)$$

Um operador \hat{X} sempre atua em um bra pela direita,

$$\langle\langle\alpha|\rangle\rangle \cdot \hat{X} = \langle\alpha|\hat{X}, \quad (2.38)$$

e o resultado é outro bra.

O ket $\hat{X}|\alpha\rangle$ e o bra $\langle\alpha|\hat{X}$ não são em geral, dual um do outro. O que há na verdade é que

$$\hat{X}|\alpha\rangle \longleftrightarrow \langle\alpha|\hat{X}^\dagger. \quad (2.39)$$

O operador \hat{X}^\dagger é chamado de **adjunto hermitiano**. Um operador é dito hermitiano se

$$\hat{X} = \hat{X}^\dagger. \quad (2.40)$$

Os operadores \hat{X} e \hat{Y} podem ser multiplicados. As operações de multiplicação não são comutativas, ou seja,

$$\hat{X}\hat{Y} \neq \hat{Y}\hat{X}, \quad (2.41)$$

mas são associativas,

$$\hat{X}(\hat{Y}\hat{Z}) = (\hat{X}\hat{Y})\hat{Z} = \hat{X}\hat{Y}\hat{Z}. \quad (2.42)$$

Temos também que

$$\hat{X}(\hat{Y}|\alpha\rangle) = (\hat{X}\hat{Y})|\alpha\rangle = \hat{X}\hat{Y}|\alpha\rangle, \quad (2.43)$$

e

$$(\langle\beta|\hat{X})\hat{Y} = \langle\beta|(\hat{X}\hat{Y}) = \langle\beta|\hat{X}\hat{Y}. \quad (2.44)$$

notemos ainda que

$$(\hat{X}\hat{Y})^\dagger = \hat{Y}^\dagger\hat{X}^\dagger, \quad (2.45)$$

pois

$$\hat{X}\hat{Y}|\alpha\rangle = \hat{X}(\hat{Y}|\alpha\rangle) \longleftrightarrow (\langle\alpha|\hat{Y}^\dagger)\hat{X}^\dagger = \langle\alpha|\hat{Y}^\dagger\hat{X}^\dagger. \quad (2.46)$$

2.6 Produto Externo

Multipliquemos $|\beta\rangle$ e $\langle\alpha|$ nesta ordem, o resultado

$$(|\beta\rangle) \cdot (\langle\alpha|) = |\beta\rangle\langle\alpha|, \quad (2.47)$$

é conhecido como produto externo de $|\beta\rangle$ e $\langle\alpha|$. Este produto deve ser considerado como um operador, logo é diferente do produto interno. Há também produtos ilegais como $|\alpha\rangle\hat{X}$ e $\hat{X}\langle\alpha|$,

que não são kets e nem bras, muito menos operadores; na realidade não fazem nenhum sentido físico nem matemático[4]. Agora, consideremos primeiramente um produto externo atuando em um ket,

$$(|\beta\rangle\langle\alpha|) \cdot |\gamma\rangle, \quad (2.48)$$

devido ao axioma da associatividade na equação (2.42), um produto externo atuando em um ket, resulta em outro ket,

$$|\beta\rangle \cdot (\langle\alpha|\gamma\rangle) = |\lambda\rangle, \quad (2.49)$$

ou seja, o produto externo pode ser entendido como um operador. Portanto, o que se nota é que o operador $|\beta\rangle\langle\alpha|$ gira $|\gamma\rangle$ na direção de $|\beta\rangle$ [4]. Note ainda que, se

$$\hat{X} = |\beta\rangle \cdot (\langle\alpha|), \quad (2.50)$$

então

$$\hat{X}^\dagger = |\alpha\rangle\langle\beta|. \quad (2.51)$$

observe que

$$(\langle\beta|) \cdot (\hat{X}|\alpha\rangle) = (\langle\beta|\hat{X}) \cdot (|\alpha\rangle). \quad (2.52)$$

Abreviando em uma notação mais compacta, temos

$$\langle\beta|\hat{X}|\alpha\rangle. \quad (2.53)$$

Lembrando que $\langle\alpha|\hat{X}^\dagger$ é o bra dual de $\hat{X}|\alpha\rangle$, de modo que

$$\langle\beta|\hat{X}|\alpha\rangle = \langle\beta| \cdot (\hat{X}|\alpha\rangle) = [(\langle\alpha|\hat{X}^\dagger) \cdot |\beta\rangle]^*, \quad (2.54)$$

para um operador \hat{X} hermitiano, temos

$$\langle\beta|\hat{X}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{X}|\beta\rangle^*. \quad (2.55)$$

2.7 Autovalores de um Observável

Consideremos os autovetores e os autovalores de um operador hermitiano \hat{A} ; este operador representa algum observável físico. Segue então um importante teorema:

Teorema 1 *Os autovalores de um operador hermitiano \hat{A} são sempre números reais; os autovetores de \hat{A} , correspondentes aos diferentes autovalores, são ortogonais[4].*

Prova: Inicialmente lembremos que

$$\hat{A}|a_m\rangle = a_m|a_m\rangle, \quad (2.56)$$

sendo \hat{A} hermitiano, temos

$$\langle \alpha_n | \hat{A} = \alpha_n^* \langle \alpha_n |, \quad (2.57)$$

no qual a_m, a_n, \dots são autovalores de \hat{A} . Se multiplicarmos em ambos os lados da equação (2.56) à esquerda por $\langle a_n |$ e em ambos os lados da equação (2.57) à direita por $|a_m\rangle$, obtemos

$$\langle a_n | \hat{A} | a_m \rangle = a_m \langle a_n | a_m \rangle, \quad (2.58)$$

e

$$\langle a_n | \hat{A} | a_m \rangle = a_n^* \langle a_n | a_m \rangle. \quad (2.59)$$

Subtraindo então as duas expressões, obtemos

$$(a_m - a_n^*) \langle a_n | a_m \rangle = 0. \quad (2.60)$$

Se $a_m = a_n^*$, deduzimos a primeira parte do teorema que diz que os autovetores de um operador hermitiano são reais; na qual usamos o fato de os kets serem não nulos. Como mostrado anteriormente, os autovalores para os operadores hermitianos são reais e a diferença $a_m - a_n^*$ também é. Então em um segundo caso, se $a_m \neq a_n^*$, temos

$$\langle a_n | a_m \rangle = 0. \quad (2.61)$$

Isto prova a segunda parte do teorema, os autovetores correspondentes a diferentes autovalores, são ortogonais. Este teorema garante que os autovalores de um operador hermitiano sejam sempre reais e por isso, que na mecânica quântica se fala a respeito de observáveis hermitianos[4]. Convenciona-se normalizar $|a_m\rangle$ de tal modo, que o conjunto $\{|a_1\rangle, |a_2\rangle, |a_3\rangle, \dots\}$, forme um conjunto ortonormal. Portanto, temos

$$\langle a_n | a_m \rangle = \delta_{a_n a_m}. \quad (2.62)$$

2.8 Autovetores como Kets de Base

Como os autovetores normalizados de \hat{A} constituem um conjunto completo ortonormal, um ket arbitrário no espaço dos estados pode ser expandido em termos dos autovetores de \hat{A} . Deste modo, os autovetores de \hat{A} devem ser usados como kets de base de forma semelhante aos vetores unitários mutuamente ortogonais, usados como vetores de base no espaço euclidiano[1, 4]. Dado um ket arbitrário $|\alpha\rangle$ no espaço gerado pelos autoestados de \hat{A} , tentemos expandi-lo da seguinte forma:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a_m} c_{a_m} |a_m\rangle. \quad (2.63)$$

Multiplicando por $\langle a_n|$ à esquerda da expressão acima e usando a propriedade de ortonormalidade vista na equação (2.62), podemos determinar os coeficientes de expansão c_{a_m} a partir do produto interno

$$\langle a_n|\alpha\rangle = \sum_{a_m} c_{a_m} \langle a_n|a_m\rangle = \sum_{a_m} c_{a_m} \delta_{a_n a_m} = c_{a_n}. \quad (2.64)$$

Portanto,

$$c_{a_m} = \langle a_m|\alpha\rangle. \quad (2.65)$$

Em outras palavras, temos

$$|\alpha\rangle = \sum_{a_m} |a_m\rangle \langle a_m|\alpha\rangle, \quad (2.66)$$

que é análogo à expansão de um vetor \vec{V} no espaço euclidiano,

$$\vec{V} = \sum_{i=1}^N \hat{e}_i (\hat{e}_i \cdot \vec{V}), \quad (2.67)$$

no qual $\{\hat{e}_i\}$, forma um conjunto ortonormal de vetores. Lembremos ainda do axioma da associatividade da multiplicação, uma vez que $|\alpha\rangle$ na equação (2.66) é um ket arbitrário, temos então,

$$\sum_{a_m} |a_m\rangle \langle a_m| = \hat{1}, \quad (2.68)$$

no qual $\hat{1}$ do lado direito da equação, deve ser entendido como o operador identidade. A equação (2.68) é conhecida como a **relação de completudeza ou fechamento**[4]. Esta relação não pode ser subestimada pois terá muita utilidade em problemas futuros. Agora consideremos por exemplo,

$\langle \alpha | \alpha \rangle$, inserindo o operador identidade entre $\langle \alpha |$ e $|\alpha\rangle$, obtemos então,

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \alpha | \sum_{a_m} |a_m\rangle \langle a_m | \alpha \rangle, \quad (2.69)$$

logo

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \sum_{a_m} \langle \alpha | a_m \rangle \langle a_m | \alpha \rangle = \sum_{a_m} \langle a_m | \alpha \rangle^* \langle a_m | \alpha \rangle, \quad (2.70)$$

o que leva a

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \sum_{a_m} |\langle a_m | \alpha \rangle|^2. \quad (2.71)$$

Sendo $|\alpha\rangle$ normalizado, temos

$$\sum_{a_m} |c_{a_m}|^2 = \sum_{a_m} |\langle a_m | \alpha \rangle|^2 = 1. \quad (2.72)$$

Olhemos agora para $|a_m\rangle \langle a_m|$ que aparece na equação (2.68); como trata-se de um produto externo e pode ser entendido como um operador; deixemos que ele atue em $|\alpha\rangle$. Obtemos então,

$$(|a_m\rangle \langle a_m|) \cdot |\alpha\rangle = |a_m\rangle \langle a_m | \alpha \rangle = c_{a_m} |a_m\rangle. \quad (2.73)$$

Podemos ver que esse operador mostra-se ser, um **operador de projeção** na direção do ket de base $|a_m\rangle$ pois, ele seleciona aquela parte de $|\alpha\rangle$ paralela a $|a_m\rangle$ [4, 8]. Este operador é representado por $\hat{\Lambda}_{a_m}$. Logo,

$$\hat{\Lambda}_{a_m} \equiv |a_m\rangle \langle a_m|, \quad (2.74)$$

e a relação de completeza vista na equação (2.68), pode agora ser escrita então como

$$\sum_{a_m} \hat{\Lambda}_{a_m} = \hat{1}. \quad (2.75)$$

2.9 Representações Matriciais

Consideremos o conjunto $\{|a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots, |a_N\rangle\}$, como sendo o conjunto dos kets de base. O que faremos agora, é mostrar como representar o operador \hat{X} em termos de uma matriz quadrada. Primeiramente notemos que um operador \hat{X} atuando num $|\alpha\rangle$ vai gerar um outro ket,

$$\hat{X}|\alpha\rangle = |\beta\rangle. \quad (2.76)$$

Para representarmos o operador \hat{X} matricialmente, sabemos que ele deve ser uma matriz quadrada, temos então

$$\hat{X} \doteq (N \times N) \Rightarrow \hat{X} \doteq (x_{ij}). \quad (2.77)$$

seja então $|\alpha\rangle$, escrito da forma matricial, como uma matriz coluna³. Temos

$$|\alpha\rangle \doteq \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}. \quad (2.78)$$

reescrevendo a equação (2.76) na forma matricial, obtemos

$$\hat{X}|\alpha\rangle \doteq \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & \dots & x_{1N} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & \dots & x_{2N} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} & \dots & x_{3N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{N1} & x_{N2} & x_{N3} & \dots & x_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \doteq |\beta\rangle, \quad (2.79)$$

pela regra do produto de matrizes, chegamos a

$$|\beta\rangle \doteq \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^N x_{1j}a_j \\ \sum_{j=1}^N x_{2j}a_j \\ \sum_{j=1}^N x_{3j}a_j \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^N x_{Nj}a_j \end{pmatrix}, \quad (2.80)$$

o que nos leva a

$$b_i = \sum_{j=1}^N x_{ij}a_j, \quad (2.81)$$

no qual b_i é o i -ésimo elemento do vetor coluna $|\beta\rangle$ escrito na forma matricial. Mas $|\beta\rangle$ pode ser expandido como

$$|\beta\rangle = \sum_{i=1}^N b_i |a_i\rangle, \quad (2.82)$$

logo temos,

$$|\beta\rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_{ij}a_j |a_i\rangle. \quad (2.83)$$

Analogamente a equação (2.82), $|\alpha\rangle$ pode ser expandido da seguinte forma:

$$|\alpha\rangle = \sum_{j=1}^N a_j |a_j\rangle, \quad (2.84)$$

³ O símbolo \doteq , significa "representado por".

no qual o coeficiente a_j é determinado pelo produto interno

$$a_j = \langle a_j | \alpha \rangle. \quad (2.85)$$

substituindo a equação (2.85) na equação (2.83), temos então

$$|\beta\rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_{ij} \langle a_j | \alpha \rangle |a_i\rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_{ij} |a_i\rangle \langle a_j | \alpha \rangle = \hat{X} |\alpha\rangle. \quad (2.86)$$

Portanto, em termos da notação de Dirac, um operador \hat{X} qualquer, pode ser representado como

$$\hat{X} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_{ij} |a_i\rangle \langle a_j|. \quad (2.87)$$

Como podemos então encontrar os elementos x_{ij} ? Para isso, usaremos a relação de completudeza duas vezes, e escrevemos o operador \hat{X} como

$$\hat{X} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N |a_i\rangle \langle a_i | \hat{X} |a_j\rangle \langle a_j|. \quad (2.88)$$

Reorganizando os termos, ficamos com

$$\hat{X} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle a_i | \hat{X} |a_j\rangle |a_i\rangle \langle a_j|. \quad (2.89)$$

Comparando a equação (2.87) com a equação (2.88), ficamos então com

$$x_{ij} = \langle a_i | \hat{X} |a_j\rangle, \quad (2.90)$$

desta forma, a matriz $\hat{X} = (x_{ij})$ poderá ser escrita explicitamente como

$$\hat{X} \doteq \begin{pmatrix} \langle a_1 | \hat{X} |a_1\rangle & \langle a_2 | \hat{X} |a_1\rangle & \dots & \langle a_1 | \hat{X} |a_N\rangle \\ \langle a_2 | \hat{X} |a_1\rangle & \langle a_2 | \hat{X} |a_2\rangle & \dots & \langle a_2 | \hat{X} |a_N\rangle \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \langle a_N | \hat{X} |a_1\rangle & \langle a_N | \hat{X} |a_2\rangle & \dots & \langle a_N | \hat{X} |a_N\rangle \end{pmatrix}. \quad (2.91)$$

2.9.1 Operador Adjunto Hermitiano

A álgebra matricial é um recurso fundamental para a formulação da mecânica quântica. O uso de matrizes para as formulações teóricas de Dirac, de Heisenberg ou até mesmo outras formulações é indispensável. Neste sentido, trabalhando explicitamente com a formulação matemática de Dirac, precisamos relembrar alguns conceitos de matrizes³. Como sabemos, as

³ Caso o leitor tenha interesse em se aprofundar no estudo da Álgebra Matricial e no estudo de Espaços Vetoriais, consulte [18, 19].

matrizes têm suas classificações, e algumas delas, são necessárias para entendermos o que é um operador adjunto hermitiano.

Primeiramente, vale relembrar o que é uma matriz transposta. A transposta de uma matriz é construída pela reflexão de seus elementos em relação à sua diagonal principal. Ou seja, é a matriz que se obtém da troca de linhas por coluna de uma dada matriz . Portanto, se

$$\hat{X} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_{ij} |a_i\rangle \langle a_j|, \quad (2.92)$$

temos

$$\hat{X}^T = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_{ji} |a_i\rangle \langle a_j|, \quad (2.93)$$

ou

$$\hat{X}^T = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_{ij} |\alpha_j\rangle \langle \alpha_i|. \quad (2.94)$$

Outro conceito importante é o conjugado complexo de uma matriz. O complexo conjugado de uma matriz é simplesmente o conjugado de seus elementos. Desta forma, temos

$$\hat{X}^* = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_{ij}^* |a_i\rangle \langle a_j|. \quad (2.95)$$

Por fim, a matriz do operador **adjunto hermitiano** é equivalente à sua própria transposta conjugada[18]. Logo temos

$$\hat{X}^\dagger = (\hat{X}^T)^* = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_{ij}^* |a_j\rangle \langle a_i|, \quad (2.96)$$

ou

$$\hat{X}^\dagger = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_{ji}^* |a_i\rangle \langle a_j|. \quad (2.97)$$

Como ja vimos, \hat{B} é um operador hermitiano se

$$\hat{B} = \hat{B}^\dagger \quad (2.98)$$

Neste caso, temos

$$\langle a_i | \hat{B} | a_j \rangle = \langle a_j | \hat{B} | a_i \rangle^*. \quad (2.99)$$

2.9.2 Matrizes Explícitas

Já foi visto que um $|\alpha\rangle$ pode ser representado matricialmente como um vetor coluna. Sendo (x_{ij}) uma matriz quadrada, mostraremos agora como representar um bra matricialmente de forma explícitas. Primeiramente sabemos que,

$$\hat{X}|\alpha\rangle = |\beta\rangle, \quad (2.100)$$

no entanto,

$$(\hat{X}|\alpha\rangle)^\dagger = (|\beta\rangle)^\dagger, \quad (2.101)$$

deste modo,

$$(|\alpha\rangle)^\dagger \hat{X}^\dagger = \langle\beta|, \quad (2.102)$$

pois

$$(\hat{X}\hat{Y})^\dagger = \hat{Y}^\dagger \hat{X}^\dagger. \quad (2.103)$$

Portanto, ficamos com

$$\langle\alpha|\hat{X}^\dagger = \langle\beta|. \quad (2.104)$$

mas a partir da equação (2.100), sabemos que tanto $|\alpha\rangle$ quanto $|\beta\rangle$ na forma matricial,

$$|a\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle a_1|a\rangle \\ \langle a_2|a\rangle \\ \vdots \\ \langle a_N|a\rangle \end{pmatrix} \Rightarrow |\beta\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle a_1|\beta\rangle \\ \langle a_2|\beta\rangle \\ \vdots \\ \langle a_N|\beta\rangle \end{pmatrix}, \quad (2.105)$$

são representados por um vetor coluna. Ora, sendo $\langle\beta| = (|\beta\rangle)^\dagger$, e $|\beta\rangle$ uma matriz coluna, concluímos então que um bra pode ser representado matricialmente como uma matriz linha.

Deste modo,

$$\langle\beta| = \left(\langle a_1|\beta\rangle^* \quad \langle a_2|\beta\rangle^* \quad \dots \quad \langle a_N|\beta\rangle^* \right). \quad (2.106)$$

O produto interno $\langle \beta | \alpha \rangle$, pode ser escrito como sendo um produto de uma matriz linha que representa $\langle \beta |$, por uma matriz coluna que é representado por $|\alpha\rangle$ [4, 8]. Logo,

$$\langle \beta | \alpha \rangle \doteq \left(\langle a_1 | \beta \rangle^* \quad \langle a_2 | \beta \rangle^* \quad \dots \quad \langle a_N | \beta \rangle^* \right) \begin{pmatrix} \langle a_1 | \alpha \rangle \\ \langle a_2 | \alpha \rangle \\ \vdots \\ \langle a_N | \alpha \rangle \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^N \langle \beta | a_i \rangle \langle a_i | \alpha \rangle. \quad (2.107)$$

Portanto

$$\langle \beta | = \sum_{i=1}^N \langle \beta | a_i \rangle \langle a_i |. \quad (2.108)$$

Finalmente, pode-se ver facilmente que a representação matricial do produto externo $|\beta\rangle\langle\alpha|$, é dado por

$$|\beta\rangle\langle\alpha| \doteq \begin{pmatrix} \langle a_1 | \beta \rangle \\ \langle a_2 | \beta \rangle \\ \vdots \\ \langle a_N | \beta \rangle \end{pmatrix} \left(\langle a_1 | \alpha \rangle^* \quad \langle a_2 | \alpha \rangle^* \quad \dots \quad \langle a_N | \alpha \rangle^* \right). \quad (2.109)$$

Portanto,

$$|\beta\rangle\langle\alpha| \doteq \begin{pmatrix} \langle a_1 | \beta \rangle \langle a_1 | \alpha \rangle^* & \langle a_1 | \beta \rangle \langle a_2 | \alpha \rangle^* & \dots & \langle a_1 | \beta \rangle \langle a_N | \alpha \rangle^* \\ \langle a_2 | \beta \rangle \langle a_1 | \alpha \rangle^* & \langle a_2 | \beta \rangle \langle a_2 | \alpha \rangle^* & \dots & \langle a_2 | \beta \rangle \langle a_N | \alpha \rangle^* \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \langle a_N | \beta \rangle \langle a_1 | \alpha \rangle^* & \langle a_N | \beta \rangle \langle a_2 | \alpha \rangle^* & \dots & \langle a_N | \beta \rangle \langle a_N | \alpha \rangle^* \end{pmatrix}. \quad (2.110)$$

Seja $\{|a_1\rangle, |a_2\rangle, |a_3\rangle, \dots, |a_N\rangle\}$, autovetores de um observável \hat{A} , podemos usá-los como kets de base e representar o operador na forma matricial de uma forma bem simples [4].

Primeiramente temos,

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N |a_i\rangle \langle a_j | \hat{A} | a_i \rangle \langle a_j |, \quad (2.111)$$

porém, como o operador é um operador que representa um observável físico, ele é hermitiano, desta forma, a matriz quadrada $\langle \alpha_j | \hat{A} | \alpha_i \rangle$ é obviamente diagonal,

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N |a_i\rangle a_i \langle a_j | a_i \rangle \langle a_j |. \quad (2.112)$$

Portanto,

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^N a_i |a_i\rangle \langle a_i| = \sum_{i=1}^N a_i \hat{\Lambda}_{a_i}. \quad (2.113)$$

2.9.2.1 Exemplo do Sistema de Spin 1/2

Consideremos como exemplo, o caso especial do sistema de Spin 1/2 visto no experimento de Stern-Gerlach. Os kets de base usados são $S_z|\pm\rangle$, que por brevidade será simplificado para $|\pm\rangle$. O operador mais simples no espaço dos kets gerado por $|\pm\rangle$ é o operador identidade[4], no qual de acordo com a equação (2.68), pode ser escrito como

$$|+\rangle\langle+|+|-\rangle\langle-| = \hat{1}. \quad (2.114)$$

Mas de acordo com a equação (2.113), \hat{S}_z poderá ser escrito como

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}[|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|]. \quad (2.115)$$

A relação de autovetores e autovalores,

$$\hat{S}_z|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle, \quad (2.116)$$

é seguido imediatamente da propriedade de ortogonalidade de $|\pm\rangle$. Também podemos notar outros dois operadores que serão de grande utilidade, mesmo ambos não sendo hermitianos,

$$\hat{S}_+ = \hbar|+\rangle\langle-|, \quad (2.117)$$

e

$$\hat{S}_- = \hbar|-\rangle\langle+|. \quad (2.118)$$

O operador \hat{S}_+ atuando no ket de Spin-Down $|-\rangle$, transforma $|-\rangle$ no ket $|+\rangle$, multiplicado pela constante \hbar . Do mesmo modo, quando o ket de Spin-Up sofre a ação do operador \hat{S}_+ , obtemos um ket nulo. Podemos afirmar assim, que \hat{S}_+ aumenta a componente de Spin por uma unidade de \hbar . Se a componente de Spin já chegou no seu valor máximo, há-se então um ket nulo. De forma análoga, o operador \hat{S}_- pode ser interpretado como o operador que diminui a componente de Spin por unidade de \hbar [4]. Da equação (2.117) e a equação (2.118), temos

$$\hat{S}_+|+\rangle = 0 \quad (2.119)$$

e

$$\hat{S}_+|-\rangle = \hbar|+\rangle. \quad (2.120)$$

Ainda temos,

$$\hat{S}_-|+\rangle = \hbar|-\rangle \quad (2.121)$$

e

$$\hat{S}_-|-\rangle = 0. \quad (2.122)$$

Agora representando na forma matricial os kets de base, no caso particular do sistema de Spin 1/2, temos

$$|+\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |-\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.123)$$

Mas de acordo com a equação (2.92), o operador \hat{S}_z pode ser escrito matricialmente como

$$\hat{S}_z \doteq \begin{pmatrix} \langle +|\hat{S}_z|+\rangle & \langle +|\hat{S}_z|-\rangle \\ \langle -|\hat{S}_z|+\rangle & \langle -|\hat{S}_z|-\rangle \end{pmatrix}. \quad (2.124)$$

Considerando a relação de autovetores e autovalores apresentada na equação (2.116), ficamos com

$$\hat{S}_z \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.125)$$

Similarmente,

$$\hat{S}_+ \doteq \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \hat{S}_- \doteq \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.126)$$

2.10 Medidas

Já desenvolvido a matemática do espaço de brás e de kets, iremos agora discutir a teoria quântica do processo de medida. Segundo Dirac : "Uma medição sempre faz o sistema pular para um autoestado da variável dinâmica sendo medida"(Dirac 1958, p.36)[20]; ou seja, antes da medida de um determinado observável \hat{A} , o sistema é representado matematicamente como uma combinação linear da forma

$$|\alpha\rangle = \sum_{a_i} c_{a_i}|a_i\rangle = \sum_{a_i} |a_i\rangle \langle a_i|\alpha\rangle. \quad (2.127)$$

Após a medição, o sistema colapsa em um dos autoestados de \hat{A} , digamos $|a_i\rangle$, ou seja,

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{Medida}} |a_i\rangle. \quad (2.128)$$

Por exemplo, um átomo de prata com uma orientação arbitrária de spin, colapsará após ser submetido a um aparato de SG do tipo $SG\hat{z}$, para $|+\rangle$ ou para $|-\rangle$ [4]. Portanto, concluímos que

o ato de medir geralmente altera o estado. No entanto, há de se considerar uma exceção, quando o estado já é um dos autoestados do observável \hat{A} [4], neste caso, temos certeza absoluta que

$$|a_i\rangle \xrightarrow{\text{Medida}} |a_i\rangle. \quad (2.129)$$

Quando a medição faz $|\alpha\rangle$ colapsar em $|a_i\rangle$, dizemos que o valor medido de \hat{A} foi a_i , este valor é o que chamamos de autovalor do observável \hat{A} .

Dado o ket $|\alpha\rangle$ visto na equação (2.127), como sendo o ket de estado do sistema antes da medida, cabe agora perguntar-se em qual dos vários autoestados de \hat{A} o sistema colapsará. Em geral não se sabe em qual dos vários $\{|a_i\rangle\}$ este sistema irá colapsar. No entanto, pela **regra de Born**, podemos postular que há uma probabilidade associada no resultado da medida, e que existe uma probabilidade do sistema colapsar para o estado $|a_i\rangle$ [12]. Portanto, sendo $|\alpha\rangle$ um ket normalizado, a probabilidade de após a medida o sistema colapsar para o estado $|a_i\rangle$ é dado por

$$P_{a_i} = |\langle a_i|\alpha\rangle|^2. \quad (2.130)$$

Esta interpretação probabilística da equação (2.130), corresponde a um dos postulados fundamentais da mecânica quântica, não podendo assim ser provado[4]. Notemos ainda que se o estado de um ket antes da medida for o próprio $|a_i\rangle$, então a probabilidade de se obter a_i como resultado do processo de medida é 100%. Além disso, é possível notar que de modo geral, medidas de um observável repetidas sucessivamente, resultarão no mesmo resultado⁴. Chegamos então a outra conclusão, se um sistema inicialmente se encontra no estado $|a_i\rangle$, a probabilidade dele colapsar para o estado $|a_j\rangle$, com $a_i \neq a_j$, é nula, justamente devido as condições de ortogonalidade entre $|a_i\rangle$ e $|a_j\rangle$. De modo geral, a probabilidade de qualquer coisa dever ser um número real positivo. Além disso, a soma de todas as alternativas possíveis é dada por

$$\sum_{a_i} |\langle a_i|\alpha\rangle|^2 = 1. \quad (2.131)$$

Definimos agora o valor esperado de \hat{A} em relação ao estado $|\alpha\rangle$, como sendo

$$\langle \hat{A} \rangle \equiv \langle \alpha|\hat{A}|\alpha\rangle. \quad (2.132)$$

A definição dada pela equação (2.132), coincide com a noção de valor medido médio, pois pela relação de completeza, temos

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{a_j} \sum_{a_i} \langle \alpha|a_j\rangle \langle a_j|\hat{A}|a_i\rangle \langle a_i|\alpha\rangle, \quad (2.133)$$

⁴ Quando nos referimos a medições sucessivas, nos referimos ao fato que elas devem ser executadas imediatamente uma após a outra.

logo,

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{a_j} \sum_{a_i} \langle \alpha | a_j \rangle \langle a_i | \hat{A} | a_i \rangle \delta_{a_i a_j} \langle a_i | \alpha \rangle = \sum_{a_i} a_i |\langle a_i | \alpha \rangle|^2, \quad (2.134)$$

no qual a_i é o valor medido e $|\langle a_i | \alpha \rangle|^2$ é a probabilidade de se obter a_i .

Há ainda uma possibilidade de se fazer uma **medição seletiva** ou **filtragem**. Esse processo consiste em selecionar apenas um dos autoestados de \hat{A} , digamos $|a_i\rangle$, e rejeitar os demais. Isto foi feito quando no experimento de Stern-Gerlach, permitiu-se que apenas uma das componentes de Spin saísse do aparelho[4]. Matematicamente, esse processo seletivo se resume a aplicar o operador de projeção $\hat{\Lambda}_{a_i}$ a $|\alpha\rangle$. Logo,

$$\hat{\Lambda}_{a_i} |\alpha\rangle = |a_i\rangle \langle a_i | \alpha \rangle. \quad (2.135)$$

2.10.1 Sistema de Spin 1/2

O que foi discutido até então é suficiente para que determinemos não apenas os autovetores de $\hat{S}_{x,y}$, $|S_x \pm\rangle$ e $|S_y \pm\rangle$, mas como também os próprios operadores \hat{S}_x e \hat{S}_y . Voltando ao experimento de Stern-Gerlach, quando o feixe $|S_x +\rangle$ passa por um aparato do tipo $SG\hat{z}$, este feixe se separa em duas componentes de intensidades iguais, o que nos leva a afirmar que o estado $|S_x +\rangle$ tem uma probabilidade de 50% de colapsar em $|\pm\rangle$ [4]. Portanto,

$$|\langle + | S_x + \rangle| = |\langle - | S_x + \rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (2.136)$$

Desta forma, podemos construir o ket $|S_x +\rangle$ em termos da base $|+\rangle$ e $|-\rangle$, como sendo

$$|S_x +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_1} |-\rangle, \quad (2.137)$$

no qual δ_1 é um número real e o ket $|S_x +\rangle$ deve ser ortogonal à $|S_x -\rangle$, já que as alternativas $|S_x +\rangle$ e $|S_x -\rangle$ são mutualmente exclusivas[4]. Ou seja,

$$\langle S_x + | S_x - \rangle = 0. \quad (2.138)$$

Portanto, o ket $|S_x -\rangle$ pode ser escrito como

$$|S_x -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_1} |-\rangle. \quad (2.139)$$

Notemos que o coeficiente de $|+\rangle$ na equação (2.137) e na equação (2.139) é um número real e positivo, essa escolha convencional se mostrará em um momento oportuno, a mais adequada.

Devido então a equação (2.113), o operador \hat{S}_x fica escrito como

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} [|S_x +\rangle \langle S_x +| - |S_x -\rangle \langle S_x -|]. \quad (2.140)$$

Substituindo a equação (2.137) e a equação (2.139) na equação (2.140), obtemos

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}[e^{-i\delta_1}|+\rangle\langle-| + e^{i\delta_1}|-\rangle\langle+|]. \quad (2.141)$$

Similarmente,

$$|S_{y\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_2}|-\rangle, \quad (2.142)$$

logo

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}[e^{-i\delta_2}|+\rangle\langle-| + e^{i\delta_2}|-\rangle\langle+|]. \quad (2.143)$$

Resta agora determinar δ_1 e δ_2 . Ainda usando os resultados obtidos a partir dos experimentos de Stern-Gerlach sequenciais, temos

$$|\langle S_{y\pm} | S_{x+} \rangle| = |\langle S_{y\pm} | S_{x-} \rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (2.144)$$

Realizando as devidas substituições, ficamos com

$$\left| \frac{1}{2}(\langle+| \pm e^{-i\delta_2}\langle-|)(|+\rangle \pm e^{i\delta_1}|-\rangle) \right| = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (2.145)$$

reajustando os termos, obtemos

$$\frac{1}{2} \left| 1 \pm e^{i(\delta_1 - \delta_2)} \right| = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (2.146)$$

o que nos leva

$$e^{i(\delta_1 - \delta_2)} + e^{-i(\delta_1 - \delta_2)} = 0. \quad (2.147)$$

Logo,

$$2\cos(\delta_1 - \delta_2) = 0, \quad (2.148)$$

portanto,

$$\delta_1 - \delta_2 = \pm \frac{\pi}{2}. \quad (2.149)$$

Concluimos que os elementos da matriz \hat{S}_x e \hat{S}_y não podem ser todos reais. Se os elementos de \hat{S}_x são reais, os de \hat{S}_y têm que ser imaginários puro e vice-versa[4]. É conveniente ainda que os elementos de \hat{S}_x sejam reais. Deste modo, se fizermos $\delta_1 = 0$ e $\delta_2 = \frac{\pi}{2}$, ficamos com

$$|S_{x\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle, \quad (2.150)$$

e

$$|S_{y\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}i|+\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle. \quad (2.151)$$

Já os operadores \hat{S}_x e \hat{S}_y , ficam

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} [|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|] \quad (2.152)$$

e

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} [-i|+\rangle\langle-| + i|-\rangle\langle+|]. \quad (2.153)$$

Agora, os operadores não hermitianos definidos na equação (2.117) e na equação (2.118), podem ser escritos em termos dos operadores \hat{S}_x e \hat{S}_y da seguinte forma:

$$\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm \hat{S}_y. \quad (2.154)$$

2.11 Observáveis Compatíveis e Incompatíveis

Dois observáveis \hat{A} e \hat{B} são ditos observáveis compatíveis quando os operadores a eles correspondentes comutam, ou seja,

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0. \quad (2.155)$$

Por outro lado, eles são ditos incompatíveis quando

$$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0, \quad (2.156)$$

por exemplo, os observáveis \hat{S}_x e \hat{S}_y são incompatíveis, pois

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z. \quad (2.157)$$

Dizemos que o espectro é dito degenerado quando dois ou mais autovetores linearmente independentes de um observável \hat{A} , compartilham o mesmo autovalor[8]. Portanto, quando isto ocorre, dizemos que há uma degenerescência. Diante disso, segue um importante teorema:

Teorema 2 *Sejam \hat{A} e \hat{B} dois observáveis compatíveis e que os autovalores de \hat{A} sejam não degenerados. Então, os elementos da matriz $\langle a_j | \hat{B} | a_i \rangle$ são todos diagonais[4].*

Prova: Em consequência de (2.155), temos que

$$\langle a_j | [\hat{A}, \hat{B}] | a_i \rangle = \langle a_j | \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} | a_i \rangle = 0, \quad (2.158)$$

pelo fato desses operadores representarem observáveis, eles são hermitianos. Logo,

$$\langle a_j | \hat{A}\hat{B} | a_i \rangle - \langle a_j | \hat{B}\hat{A} | a_i \rangle = (a_j - a_i) \langle a_j | \hat{B} | a_i \rangle = 0, \quad (2.159)$$

contanto que $a_j \neq a_i$, temos que

$$\langle a_j | \hat{B} | a_i \rangle = 0, \quad (2.160)$$

o que prova nossa afirmação. Ou seja, \hat{B} é diagonal na base dos kets $\{|a_i\rangle\}$. Portanto, os elementos da matriz \hat{B} pode ser escrita como

$$\langle a_j | \hat{B} | a_i \rangle = \delta_{a_i a_j} \langle a_i | \hat{B} | a_i \rangle. \quad (2.161)$$

Em decorrência disso, agora podemos escrever o operador \hat{B} como

$$\hat{B} = \sum_{a_j} \sum_{a_i} |a_j\rangle \langle a_j | \hat{B} | a_i \rangle \langle a_i|, \quad (2.162)$$

o que nos leva a

$$\hat{B} = \sum_{a_j} \sum_{a_i} |a_j\rangle \delta_{a_j a_i} \langle a_i | \hat{B} | a_i \rangle \langle a_i|. \quad (2.163)$$

Portanto, temos

$$\hat{B} = \sum_{a_j} |a_j\rangle \langle a_j | \hat{B} | a_j \rangle \langle a_j|, \quad (2.164)$$

de modo que se \hat{B} atua em um autoket de \hat{A} , temos

$$\hat{B} | a_i \rangle = \sum_{a_j} |a_j\rangle \langle a_j | \hat{B} | a_j \rangle \langle a_j | a_i \rangle = \sum_{a_j} |a_j\rangle \langle a_j | \hat{B} | a_j \rangle \delta_{a_j a_i} \langle a_i | a_i \rangle = \langle a_i | \hat{B} | a_i \rangle | a_i \rangle. \quad (2.165)$$

Desta forma, a partir da equação (2.165), temos uma equação de autovalores e autovetores para \hat{B} . Logo,

$$\hat{B} | a_i \rangle = b_i | a_i \rangle, \quad (2.166)$$

no qual

$$b_i = \langle a_i | \hat{B} | a_i \rangle. \quad (2.167)$$

Podemos concluir então, que os autovetores $|a_i\rangle$ são simultâneos tanto do operador \hat{A} quanto de \hat{B} . Esta prova consistia no caso em que os autovetores de \hat{A} era não degenerados, mas a afirmação continuaria verdadeira mesmo se houvesse uma degenerescência de ordem n [4][21].

Deste modo, seja \hat{A} e \hat{B} dois observáveis compatíveis, eles têm um grupo de autovetores simultâneos, tal que podemos usar $|a_i, b_i\rangle$ como um autoket simultâneo de \hat{A} e \hat{B} com as seguintes propriedades:

$$\hat{A}|a_i, b_i\rangle = a_i|a_i, b_i\rangle, \quad (2.168)$$

e

$$\hat{B}|a_i, b_i\rangle = b_i|a_i, b_i\rangle. \quad (2.169)$$

No caso em que não há degenerescência, essa notação torna-se obsoleta, já que se especificamos a_i , conseqüentemente conhecemos b_i que aparecem em $|a_i, b_i\rangle$ [4]. De modo geral, em caso de degenerescência, devemos procurar por um grupo de observáveis compatíveis, tal que

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{C}] = [\hat{B}, \hat{C}] = \dots = 0. \quad (2.170)$$

Podemos ainda, escrever o autoket simultâneo como

$$|K_i\rangle = |a_i, b_i, c_i, \dots\rangle, \quad (2.171)$$

tal que a relação de completeza fica,

$$\sum_{k_i} |K_i\rangle \langle K_i| = \sum_{a_i} \sum_{b_i} \sum_{c_i} \dots |a_i, b_i, c_i, \dots\rangle \langle a_i, b_i, c_i, \dots| = 1, \quad (2.172)$$

no qual K_i é o índice para n autokets simultâneos. A relação de ortogonalidade fica sendo

$$\langle K_j | K_i \rangle = \langle a_j, b_j, c_j, \dots | a_i, b_i, c_i, \dots \rangle = \delta_{a_i a_j} \delta_{b_i b_j} \delta_{c_i c_j} \dots \quad (2.173)$$

Em resumo, sendo \hat{A} e \hat{B} observáveis compatíveis, no qual os autovalores de \hat{A} são não degenerados, se medirmos \hat{A} , certamente obteremos a_i . Se em seguida, medirmos \hat{B} , certamente obteremos b_i . No entanto, se medirmos \hat{A} mais uma vez, podemos afirmar que a terceira medida retornará a_i com absoluta certeza[4]. Ou seja, a segunda medida (\hat{B}) realizada, não destrói a informação obtida previamente na medida de \hat{A} .

No caso em que há degenerescência, depois da primeira medida de \hat{A} , que resulta também em a_i , o sistema colapsa em uma combinação linear do tipo

$$\sum_m^n C_{a_i}^{(m)} |a_i, b^{(m)}\rangle, \quad (2.174)$$

no qual n é o grau de degenerescência e os kets $|a_i, b^{(m)}\rangle$ possuem todos os mesmos autovalores a_i no qual se refere ao operador \hat{A} . Realizando então uma segunda medida (\hat{B}), seleciona-se apenas um dos termos da combinação linear (2.174), mas se fizermos uma terceira medida novamente de \hat{A} , vamos sempre continuar obtendo a_i [4]. Podemos concluir então, é que havendo ou não degenerescência, as respectivas medidas de \hat{A} e de \hat{B} não interferem uma na outra.

Já quando se trata dos observáveis incompatíveis⁵, eles não possuem um conjunto completo de autovalores simultâneos e $|a_i, b_i\rangle$, em geral não faz sentido.

2.12 Relação de Incerteza

Dado um observável \hat{A} , definimos um operador

$$\Delta\hat{A} \equiv \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle. \quad (2.175)$$

Em seguida, definimos a partir deste operador, a **variância** ou **dispersão** de \hat{A} , como sendo

$$\sigma_A^2 \equiv \langle(\Delta\hat{A})^2\rangle = \langle(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2\rangle. \quad (2.176)$$

Em síntese, podemos dizer que a dispersão σ^2 de \hat{A} , vai dizer o quanto que as medidas individuais de \hat{A} , difere da média de todas as medidas[8]. Logo temos

$$\sigma_A^2 = \langle(\Delta\hat{A})^2\rangle = \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2. \quad (2.177)$$

Notemos que para um dado estado que é autoestado de \hat{A} , a dispersão é zero.

Antes de continuar falando das relações de incerteza, cabe aqui antes, enunciar três lemas necessários para falar com propriedades do principio da incerteza para dois observáveis \hat{A} e \hat{B} quaisquer.

Lema 1 *A desigualdade de Schwarz nos diz que,*

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \geq |\langle\alpha|\beta\rangle|^2. \quad (2.178)$$

⁵ Caso haja interesse em se aprofundar no caso de observáveis incompatíveis, consulte o primeiro capítulo de [4]. A brevidade aqui não atrapalha o desenvolvimento da teoria.

Prova: Notemos que para um dado ket $|\gamma\rangle$, temos a seguinte condição:

$$\langle\gamma|\gamma\rangle \geq 0, \quad (2.179)$$

definimos então $|\gamma\rangle$ como sendo

$$|\gamma\rangle = |\alpha\rangle + \lambda|\beta\rangle, \quad (2.180)$$

no qual λ é tal que

$$\langle\beta|\gamma\rangle = 0. \quad (2.181)$$

O correspondente dual de $|\gamma\rangle$ é dado por

$$\langle\gamma| = \langle\alpha| + \lambda^*\langle\beta|. \quad (2.182)$$

Da equação (2.181), temos

$$\langle\beta|\gamma\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle + \lambda\langle\beta|\beta\rangle, \quad (2.183)$$

o que leva a

$$\lambda = -\frac{\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}. \quad (2.184)$$

Calculando o produto interno:

$$\langle\gamma|\gamma\rangle = (\langle\alpha| + \lambda^*\langle\beta|)(|\alpha\rangle + \lambda|\beta\rangle) \geq 0, \quad (2.185)$$

e substituindo a equação (2.184) na equação (2.185) e ainda fazendo as devidas distribuições dos termos, chegamos a

$$\langle\alpha|\alpha\rangle - \frac{\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}\langle\alpha|\beta\rangle - \frac{\langle\alpha|\beta\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}\langle\beta|\alpha\rangle + \frac{\langle\alpha|\beta\rangle\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle\langle\beta|\beta\rangle}\langle\beta|\beta\rangle \geq 0, \quad (2.186)$$

o que leva a

$$\langle\alpha|\alpha\rangle - \frac{\langle\alpha|\beta\rangle\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}\langle\beta|\alpha\rangle \geq 0. \quad (2.187)$$

Portanto, temos

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle - |\langle\alpha|\beta\rangle|^2 \geq 0, \quad (2.188)$$

que é equivalente a equação (2.178).

Lema 2 *O valor esperado de um operador hermitiano é um número real puro.*

Prova: Este resultado já foi obtido no início do capítulo.

Lema 3 *O valor esperado de um operador anti-hermitiano, definido por $\hat{C} = -\hat{C}^\dagger$ é um número imaginário puro.*

Prova: Temos que,

$$\langle a_j | \hat{C} | a_i \rangle = -\langle a_j | \hat{C}^\dagger | a_i \rangle, \quad (2.189)$$

logo,

$$a_i \langle a_j | a_i \rangle = -a_j^* \langle a_j | a_i \rangle. \quad (2.190)$$

Portanto, temos

$$(a_i + a_j^*) \langle a_j | a_i \rangle = 0. \quad (2.191)$$

Para $i = j$, temos que o valor esperado é um número puramente imaginário, e para $i \neq j$, $\langle a_j | a_i \rangle = 0$.

Munido destes três lemas, podemos agora construir o princípio da incerteza para dois observáveis \hat{A} e \hat{B} quaisquer. Seja o observável \hat{A} , temos que

$$\sigma_A^2 = \langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle = \langle \alpha | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 | \alpha \rangle = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \alpha | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \alpha \rangle = \langle \Psi_1 | \Psi_1 \rangle, \quad (2.192)$$

no qual

$$|\Psi_1\rangle \equiv (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) | \alpha \rangle. \quad (2.193)$$

Analogamente, para um observável \hat{B} , temos

$$\sigma_B^2 = \langle \Psi_2 | \Psi_2 \rangle, \quad (2.194)$$

no qual

$$|\Psi_2\rangle \equiv (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) | \alpha \rangle. \quad (2.195)$$

Pela desigualdade de Schwars,

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 = \langle \Psi_1 | \Psi_1 \rangle \langle \Psi_2 | \Psi_2 \rangle \geq |\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle|^2, \quad (2.196)$$

E para qualquer número complexo Z ,

$$|Z|^2 = |R_e(Z)|^2 + |I_m(Z)|^2. \quad (2.197)$$

Desta forma, temos que a parte imaginária obedece a

$$I_m(Z) = \frac{1}{2i}(Z - Z^*), \quad (2.198)$$

consequentemente,

$$|Z|^2 \geq |I_m(Z)|^2 = \left| \frac{1}{2i}(Z - Z^*) \right|^2 \quad (2.199)$$

sendo então

$$Z = \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle. \quad (2.200)$$

Partindo das equações (2.196), (2.198) e (2.199), temos

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq |\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle|^2 = |Z|^2 \geq \left| \frac{1}{2i} \left[\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle - \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle \right] \right|^2. \quad (2.201)$$

No entanto, temos

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \alpha | (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \alpha \rangle = \langle \hat{A} \hat{B} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle, \quad (2.202)$$

similarmente

$$\langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle = \langle \hat{B} \hat{A} \rangle - \langle \hat{B} \rangle \langle \hat{A} \rangle. \quad (2.203)$$

Realizando a diferença entre a equação (2.203) e a equação (2.202),

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle - \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle = \langle \hat{A} \hat{B} \rangle - \langle \hat{B} \hat{A} \rangle = \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \quad (2.204)$$

chegamos portanto a,

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \frac{1}{4} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2. \quad (2.205)$$

O que podemos então concluir é que existe uma incerteza associada quando os observáveis são incompatíveis, ou seja, quando os operadores correspondentes não comutam. Neste caso, para os observáveis incompatíveis, não se pode ter informações precisas e simultâneas dos dois observáveis ao mesmo tempo. Este é o caso do princípio da incerteza de Heisenberg, no qual não se pode ter informações acerca do momento e da posição simultaneamente com precisão e ao mesmo tempo [8][10]. No caso dos observáveis compatíveis, no qual os operadores correspondentes comutam, não há esta incerteza.

2.13 Mudança de Base

Notamos desde o início o quão importante é trabalhar com a notação de Dirac na mecânica quântica e quão grande é a sua utilidade. Neste prelúdio percorrido até aqui, já vimos que o ket possui toda informação física possível. Se no entanto, determino um base específica, posso conseqüentemente extrair uma informação específica. Em síntese, um ket pode ser expresso em termos de bases distintas.

2.13.1 Operador de Transformação

Vimos que para sistemas de spin $\frac{1}{2}$, $|S_x \pm\rangle$ pode ser usado como kets de base, ou como geralmente se usa $|\pm\rangle$, também pode. Embora o sistema possa ser expresso em bases diferentes, obviamente, os diferentes conjuntos de kets geram o mesmo espaço de kets[4]. O objetivo agora é construir um operador de transformação que relacione a antiga base ortonormal $\{|a_i\rangle\}$ com a nova base ortonormal $\{|b_i\rangle\}$. Em resumo, isso se refere a uma **mudança de base** ou **mudança de representação**. Para isso, segue-se um teorema fundamental:

Teorema 3 *Dado dois conjuntos de kets de base $\{|a_i\rangle\}$ e $\{|b_i\rangle\}$, ambos satisfazendo as condições de ortonormalidade e completeza, existe um operador unitário \hat{U} tal que*

$$|b_1\rangle = \hat{U}|a_1\rangle, |b_2\rangle = \hat{U}|a_2\rangle, \dots, |b_n\rangle = \hat{U}|a_n\rangle. \quad (2.206)$$

Um operador é dito **operador unitário** quando satisfaz às seguintes condições:

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{1}, \quad (2.207)$$

e

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}. \quad (2.208)$$

Prova: Seja então um operador \hat{U} dado por

$$\hat{U} = \sum_k |b_k\rangle\langle a_k|, \quad (2.209)$$

se aplicarmos este operador no ket $|a_l\rangle$, temos

$$\hat{U}|a_l\rangle = \sum_k |b_k\rangle\langle a_k|a_l\rangle = \sum_k |b_k\rangle\delta_{kl} = |b_l\rangle. \quad (2.210)$$

Temos ainda que \hat{U} é unitário, então

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \sum_k \sum_l |a_k\rangle\langle b_k|b_l\rangle\langle a_l| = \sum_k \sum_l |a_k\rangle\langle a_l|\delta_{kl} = \sum_k |a_k\rangle\langle a_k| = \hat{1}. \quad (2.211)$$

A equação (2.207) pode ser obtida de forma análoga.

2.13.2 Matriz de Transformação

A representação matricial do operador \hat{U} na antiga base $\{|a_i\rangle\}$, é dada por

$$\langle a_k|\hat{U}|a_l\rangle = \langle a_k|b_l\rangle, \quad (2.212)$$

ou seja, os elementos da matriz do operador \hat{U} são construídos a partir dos produtos internos entre os bras da base antiga com os kets da base nova[4]. É similar ao caso da matriz de rotação em três dimensões, que transforma um conjunto de versores $(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3)$ em outro conjunto $(\hat{x}'_1, \hat{x}'_2, \hat{x}'_3)$. Em Goldstein (2002) pp. 134-144[22], vemos que o operador de transformação na forma matricial é dado por

$$\hat{R} \doteq \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \cdot \hat{x}'_1 & \hat{x}_1 \cdot \hat{x}'_2 & \hat{x}_1 \cdot \hat{x}'_3 \\ \hat{x}_2 \cdot \hat{x}'_1 & \hat{x}_2 \cdot \hat{x}'_2 & \hat{x}_2 \cdot \hat{x}'_3 \\ \hat{x}_3 \cdot \hat{x}'_1 & \hat{x}_3 \cdot \hat{x}'_2 & \hat{x}_3 \cdot \hat{x}'_3 \end{pmatrix}, \quad (2.213)$$

deste modo, $\langle a_k|\hat{U}|a_l\rangle$ pode ser chamada de matriz de transformação da base $\{|a_i\rangle\}$ para a base $\{|b_i\rangle\}$. Vamos considerar a transformação de um ket arbitrário $|\alpha\rangle$, tal que

$$|\alpha\rangle = \sum_{a_i} |a_i\rangle \langle a_i|\alpha\rangle. \quad (2.214)$$

Logo, para obtermos os coeficientes de expansão na nova base, temos

$$\langle b_k|\alpha\rangle = \langle b_k|\sum_l |a_l\rangle \langle a_l|\alpha\rangle = \sum_l \langle b_k|a_l\rangle \langle a_l|\alpha\rangle, \quad (2.215)$$

da equação (2.206), temos

$$\langle b_k| = \langle a_k|\hat{U}^\dagger, \quad (2.216)$$

logo,

$$\langle b_k|\alpha\rangle = \sum_l \langle a_k|\hat{U}^\dagger|a_l\rangle \langle a_l|\alpha\rangle. \quad (2.217)$$

Portanto, a matriz coluna para $|\alpha\rangle$ na nova base pode ser obtida ao aplicar a matriz quadrada \hat{U}^\dagger à matriz coluna de $|\alpha\rangle$ na base antiga[4]. Logo,

$$(|\alpha\rangle)_{b_n} = (\hat{U}^\dagger)(|\alpha\rangle)_{a_n}. \quad (2.218)$$

Suponhamos agora, que os elementos da matriz do operador \hat{X} na base antiga são conhecidos, agora queremos saber quem são esses elementos na nova base. Portanto, temos

$$\langle b_k|\hat{X}|b_l\rangle = \sum_m \sum_n \langle b_k|a_m\rangle \langle a_m|\hat{X}|a_n\rangle \langle a_n|b_l\rangle, \quad (2.219)$$

o que nos leva a

$$\langle b_k | \hat{X} | b_l \rangle = \sum_m \sum_n \langle a_k | \hat{U}^\dagger | a_m \rangle \langle a_m | \hat{X} | a_n \rangle \langle a_n | \hat{U} | a_l \rangle. \quad (2.220)$$

Da álgebra matricial, a equação (2.220) é conhecida como a fórmula para uma **transformação de similaridade**. Portanto,

$$\hat{X}' = \hat{U}^\dagger \hat{X} \hat{U}. \quad (2.221)$$

O **traço** de um operador \hat{X} é definido como sendo a soma de seus elementos diagonais:

$$Tr(\hat{X}) = \sum_{a_i} \langle a_i | \hat{X} | a_i \rangle. \quad (2.222)$$

Uma característica importante é que o traço de um operador é independente da representação, ou seja, pode-se usar um outro conjunto como kets de base como mostrado a seguir:

$$Tr(\hat{X}) = \sum_{a_i} \langle a_i | \hat{X} | a_i \rangle = \sum_{a_i} \sum_{b_i} \sum_{b_j} \langle a_i | b_i \rangle \langle b_i | \hat{X} | b_j \rangle \langle b_j | a_i \rangle, \quad (2.223)$$

logo,

$$Tr(\hat{X}) = \sum_{b_i} \sum_{b_j} \langle b_j | b_i \rangle \langle b_i | \hat{X} | b_j \rangle = \sum_{b_i} \langle b_i | \hat{X} | b_i \rangle. \quad (2.224)$$

2.13.3 Diagonalização

Suponhamos que os elementos de um operador \hat{B} na base antiga $\{a_i\}$ são conhecidos, resta-nos agora saber, como encontrar os autovalores e os autovetores deste operador. Queremos obter os autovalores b_i e os autokets $|b_i\rangle$ que satisfazem a propriedade:

$$\hat{B}|b_i\rangle = b_i|b_i\rangle. \quad (2.225)$$

Reescrevendo a equação (2.225), ficamos com

$$\sum_{a_i} \langle a_j | \hat{B} | a_i \rangle \langle a_i | b_i \rangle = b_i \langle a_j | b_i \rangle. \quad (2.226)$$

Quando $|b_i\rangle$ na equação (2.225), representar o i -ésimo autovetor de \hat{B} , podemos então o representar matricialmente como

$$\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} & \dots \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C_1^i \\ C_2^i \\ \vdots \end{pmatrix} = b_i \begin{pmatrix} C_1^i \\ C_2^i \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (2.227)$$

tal que

$$B_{ij} = \langle a_k | \hat{B} | a_j \rangle, \quad (2.228)$$

e

$$C_k^l = \langle a_k | b_l \rangle, \quad (2.229)$$

no qual i, j , e k , variam até N , e no qual corresponde a dimensão do espaço dos kets.

As soluções não triviais para C_k^l são possíveis apenas se a equação característica for satisfeita[4]. Portanto, a equação característica é dada por

$$\det(\hat{B} - \lambda \hat{I}) = 0, \quad (2.230)$$

que é a equação algébrica de ordem N em λ . Então, se conhecemos os autovalores, consequentemente podemos determinar os autovetores.

3 FORMALISMO MATEMÁTICO DE DIRAC PARA ESPECTROS CONTÍNUOS

Tudo o que foi construído anteriormente em termos do formalismo de Dirac, considerava-se apenas observáveis que possuíam espectros discretos. Vimos que no caso das partículas de spin 1/2, a projeção de spin podia assumir apenas dois valores reais, $-\hbar/2$ e $+\hbar/2$ [4]. No entanto, na mecânica quântica alguns observáveis possuem a propriedade de assumir espectros contínuos, por exemplo, a posição e o momento. Estes dois observáveis específicos, em princípio possuem um conjunto infinito de valores para o resultado da medida.

Para trabalhar com tais observáveis, é preciso antes fazer algumas generalizações de resultados obtidos anteriormente para observáveis de espectros discretos. Iniciemos com a equação de autovetores e autovalores, que para espectros contínuos fica

$$\hat{\xi}|\xi_i\rangle = \xi_i|\xi_i\rangle. \quad (3.1)$$

Em resumo, o ket $|\xi_i\rangle$ é um autovetor de $\hat{\xi}$ com autovalor ξ_i .

De modo geral, para esta generalização os resultados expressos em termos de um somatório, torna-se-ão uma integral sobre a variável contínua ξ_i , e os que eram expressos em termos da delta de Kronecker, tornar-se-ão uma função delta de Dirac⁶. Logo

$$\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{a_i a_j} \rightarrow \langle \xi_i|\xi_j\rangle = \delta(\xi_i - \xi_j), \quad (3.2)$$

$$\sum_{a_i} |a_i\rangle\langle a_i| = \hat{1} \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_i |\xi_i\rangle\langle \xi_i| = \hat{1}, \quad (3.3)$$

$$|\alpha\rangle = \sum_{a_i} |a_i\rangle\langle a_i|\alpha\rangle \rightarrow |\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_i |\xi_i\rangle\langle \xi_i|\alpha\rangle, \quad (3.4)$$

$$\sum_{a_i} |\langle a_i|\alpha\rangle|^2 = 1 \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_i |\langle \xi_i|\alpha\rangle|^2 = 1, \quad (3.5)$$

$$\langle \beta|\alpha\rangle = \sum_{a_i} \langle \beta|a_i\rangle\langle a_i|\alpha\rangle \rightarrow \langle \beta|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_i \langle \beta|\xi_i\rangle\langle \xi_i|\alpha\rangle, \quad (3.6)$$

$$\langle a_j|\hat{A}|a_i\rangle = a_i\delta_{a_i a_j} \rightarrow \langle \xi_j|\hat{\xi}|\xi_i\rangle = \xi_i\delta(\xi_j - \xi_i). \quad (3.7)$$

⁶ Caso haja interesse do leitor em aprofundar o conhecimento acerca das Funções Delta, consulte[23]

3.1 Autokets e Medidas de Posição

Vimos que os observáveis com espectros contínuos exigem uma nova descrição em contraste do que foi visto com observáveis de espectros discretos. Vejamos então um exemplo específico, o operador posição.

Temos que os autovetores $|x_i\rangle$ do operador hermitiano \hat{X} que satisfazem

$$\hat{X}|x_i\rangle = x_i|x_i\rangle, \quad (3.8)$$

formam um conjunto completo. Podemos ainda, expandir um ket arbitrário $|\alpha\rangle$ na base $\{x_i\}$, da seguinte forma:

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i |x_i\rangle \langle x_i|\alpha\rangle. \quad (3.9)$$

A regra de Born, no caso do operador posição é dada por

$$P_{x_i} = |\langle x_i|\alpha\rangle|^2 dx_i, \quad (3.10)$$

que deve ser interpretada como a probabilidade de medirmos um ket arbitrário inicial $|\alpha\rangle$ em uma posição entre x_i e $x_i + dx_i$.

Por outro lado, a probabilidade de encontrarmos a partícula entre $-\infty$ e $+\infty$, é dada por

$$P = \int_{-\infty}^{+\infty} |\langle x_i|\alpha\rangle|^2 dx_i. \quad (3.11)$$

Notemos que se a partícula existe, ela será medida em algum lugar no intervalo $(-\infty, +\infty)$. Ou seja, se $|\alpha\rangle$ é normalizado, o resultado da integral em (3.11) é 1, pois

$$P = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \alpha|x_i\rangle \langle x_i|\alpha\rangle dx_i = \langle \alpha|\alpha\rangle = 1. \quad (3.12)$$

Notemos ainda que a função de onda para o estado físico representado por $|\alpha\rangle$ é dada por

$$\psi_\alpha(x_i) = \langle x_i|\alpha\rangle. \quad (3.13)$$

Podemos ainda generalizar e representar um ket $|\alpha\rangle$ em termos de autokets de posição em três dimensões. Logo,

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i dy_i dz_i |x_i, y_i, z_i\rangle \langle x_i, y_i, z_i|\alpha\rangle. \quad (3.14)$$

Simplificando a (3.14), ficamos com

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x_i |\mathbf{x}_i\rangle \langle \mathbf{x}_i | \alpha \rangle, \quad (3.15)$$

cujo ket $|\mathbf{x}_i\rangle$ é autoket simultâneo dos operadores $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$, ou seja,

$$|\mathbf{x}_i\rangle \equiv |x_i, y_i, z_i\rangle. \quad (3.16)$$

Agora, se são simultâneos, os operadores correspondem a observáveis compatíveis. Portanto,

$$\hat{x}|\mathbf{x}_i\rangle = x_i|\mathbf{x}_i\rangle, \quad (3.17)$$

$$\hat{y}|\mathbf{x}_i\rangle = y_i|\mathbf{x}_i\rangle, \quad (3.18)$$

$$\hat{z}|\mathbf{x}_i\rangle = z_i|\mathbf{x}_i\rangle. \quad (3.19)$$

Disto segue, que os operadores $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ comutam entre si. Logo,

$$[\hat{x}_m, \hat{x}_n], \quad (3.20)$$

no qual \hat{x}_1, \hat{x}_2 e \hat{x}_3 representam \hat{x}_i, \hat{y}_i e \hat{z}_i respectivamente.

3.2 Operador Translação

Consideremos agora a introdução de um novo operador que muda o estado que de início era bem localizado em torno de $|\mathbf{x}_i\rangle$, para outro estado também localizado, quer seja $|\mathbf{x}_i + d\mathbf{x}_i\rangle$. O operador $\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)$ que realiza esta mudança é chamado de **operador de translação**, e a operação deste tipo é chamada de **translação infinitesimal**. Temos que

$$\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)|\mathbf{x}_i\rangle = |\mathbf{x}_i + d\mathbf{x}_i\rangle. \quad (3.21)$$

Ou seja, o operador de translação $\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)$ aplicado em um ket de posição, resulta em um novo autoestado de posição, mas transladado por um fator $d\mathbf{x}_i$. Notemos ainda, que $|\mathbf{x}_i\rangle$ não é autovetor de $\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)$ [4].

Verifiquemos agora, qual é o efeito causado sobre um ket arbitrário $|\alpha\rangle$, se aplicarmos sobre ele o operador de translação:

$$\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)|\alpha\rangle = \hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i) \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x_i |\mathbf{x}_i\rangle \langle \mathbf{x}_i | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x_i |\mathbf{x}_i + d\mathbf{x}_i\rangle \langle \mathbf{x}_i | \alpha \rangle. \quad (3.22)$$

Antes de definirmos propriamente o operador de translação, é útil antes listar algumas propriedades inerentes à ele. A primeira é a propriedade da unitaricidade, imposta pela conservação de probabilidade. Ou seja, o ket transladado $\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)|\alpha\rangle$ também é normalizado. Logo,

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{\mathcal{S}}^\dagger(d\mathbf{x}_i)\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)|\alpha\rangle = 1, \quad (3.23)$$

o que leva na unitaricidade da translação infinitesimal,

$$\hat{\mathcal{S}}^\dagger(d\mathbf{x}_i)\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i) = \hat{1}. \quad (3.24)$$

A segunda propriedade está associada as composições de translações, ou seja, às translações infinitesimais sucessivas. Se primeiro há um deslocamento $d\mathbf{x}_i$ e depois por $d\mathbf{x}_j$, no qual $d\mathbf{x}_i$ e $d\mathbf{x}_j$, não precisam necessariamente está na mesma direção. Podemos então afirmar que

$$\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_j)\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i) = \hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i + d\mathbf{x}_j). \quad (3.25)$$

Ou seja, para espaços euclidianos, o operador de translação tem um caráter aditivo⁷. Esta propriedade é importante e veremos mais a frente que para espaços curvos, o operador deixa de apresentar esta característica.

A terceira propriedade garante que uma translação na direção oposta é equivalente ao inverso da translação original. Logo,

$$\hat{\mathcal{S}}(-d\mathbf{x}_i) = \hat{\mathcal{S}}^{-1}(d\mathbf{x}_i). \quad (3.26)$$

Como quarta propriedade, temos que quando $d\mathbf{x}_i \rightarrow 0$, a operação de translação se reduz ao operador identidade. Portanto,

$$\lim_{d\mathbf{x}_i \rightarrow 0} \hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i) = \hat{1}. \quad (3.27)$$

Agora, a partir destas propriedades é fácil verificar que o operador translação pode ser definido como

$$\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i) = \hat{1} - i\hat{K} \cdot d\mathbf{x}_i. \quad (3.28)$$

Todas as propriedades mencionadas são satisfeitas se considerarmos que as componentes de \hat{K} são operadores hermitianos[4]. Por questão de brevidade no texto, a demonstração de algumas destas propriedades encontram-se inseridas no Apêndice A.

⁷ A demonstração dessa propriedade que se encontra no apêndice A é considerada para um espaço euclidiano.

A partir desta definição, podemos agora deduzir uma relação fundamental entre $\hat{\mathbf{X}}$ e \hat{K} . Notemos que

$$\hat{\mathbf{X}}\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)|\mathbf{x}_i\rangle = \hat{\mathbf{X}}|\mathbf{x}_i + d\mathbf{x}_i\rangle = (\mathbf{x}_i + d\mathbf{x}_i)|\mathbf{x}_i + d\mathbf{x}_i\rangle, \quad (3.29)$$

e

$$\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)\hat{\mathbf{X}}|\mathbf{x}_i\rangle = \mathbf{x}_i\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)|\mathbf{x}_i\rangle = \mathbf{x}_i|\mathbf{x}_i + d\mathbf{x}_i\rangle, \quad (3.30)$$

logo,

$$[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)]|\mathbf{x}_i\rangle = (\hat{\mathbf{X}}\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i) - \hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)\hat{\mathbf{X}})|\mathbf{x}_i\rangle = (\mathbf{x}_i + d\mathbf{x}_i)|\mathbf{x}_i + d\mathbf{x}_i\rangle - \mathbf{x}_i|\mathbf{x}_i + d\mathbf{x}_i\rangle, \quad (3.31)$$

o que leva a

$$[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)]|\mathbf{x}_i\rangle = d\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_i + d\mathbf{x}_i\rangle \approx d\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_i\rangle, \quad (3.32)$$

no qual o erro cometido ao se fazer a aproximação no último passo de (3.32) é de segunda ordem em $d\mathbf{x}_i$ [4].

O ket $|\mathbf{x}_i\rangle$ pode ser qualquer ket de posição, e além disso, esses kets formam um conjunto completo. Portanto, temos um operador identidade

$$[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)] = d\mathbf{x}_i, \quad (3.33)$$

ou

$$-i[\hat{\mathbf{X}}, \hat{K}]d\mathbf{x}_i = d\mathbf{x}_i, \quad (3.34)$$

no qual do lado direito da equação (3.33) e da equação (3.34), $d\mathbf{x}_i$ deve ser interpretado como um número $d\mathbf{x}_i$ multiplicado pelo operador identidade no espaço de kets gerado por $|\mathbf{x}_i\rangle$ [4]. Temos ainda que,

$$[\hat{\mathbf{X}}, \hat{K}_x] = i, \quad (3.35)$$

e

$$[\hat{\mathbf{X}}, \hat{K}_y] = [\hat{\mathbf{X}}, \hat{K}_z] = 0; \quad (3.36)$$

Deste modo, se escolhermos $d\mathbf{x}_i$ na direção de $\hat{\mathbf{X}}_m$ e realizarmos um produto escalar com $\hat{\mathbf{X}}_n$, ficamos com

$$[\hat{\mathbf{X}}_m, \hat{K}_n] = i\delta_{mn}, \quad (3.37)$$

no qual devemos interpretar δ_{mn} como estando multiplicando o operador identidade[4].

3.2.1 Momento como Gerador de Translações

Até agora, o operador hermitiano \hat{K} foi definido em termos do operador de translação infinitesimal, mas ainda não foi dado à ele uma interpretação física. O operador $\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)$ é adimensional, o que nos leva a afirmar, pela equação (3.28), que \hat{K} tem dimensão de inverso de comprimento[4]. Se queremos então, tomar emprestado a ideia de que o momento é gerador de translação infinitesimal assim como ocorre na mecânica clássica, podemos impor que

$$\hat{K} = \frac{\hat{P}}{C}, \quad (3.38)$$

no qual C é uma constante universal com dimensão de ação. A constante que aparece na equação (3.38) é a mesma constante \hbar que aparece na relação de L. de broglie[12, 24],

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}, \quad (3.39)$$

no qual λ é o comprimento de onda. Notemos a partir da equação (3.38) e da equação (3.39), a semelhança de k e \hat{K} , ambos os termos têm a mesma dimensão e se relacionam com o momento. Deste modo, escrevemos o operador $\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)$ como

$$\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i) = \hat{1} - \frac{i\hat{\mathbf{P}}}{\hbar}d\mathbf{x}_i, \quad (3.40)$$

no qual $\hat{\mathbf{P}}$ e \hbar são o momento e a constante de Planck dividida por 2π , respectivamente. A relação de comutação na equação (3.37), fica então

$$[\hat{X}_m, \hat{P}_n] = i\hbar\delta_{mn}. \quad (3.41)$$

A equação (3.41) é conhecida como a relação de comutação fundamental da mecânica quântica[4].

Notemos que as relações de comutações em (3.41), implicam que se $m = n$, os observáveis são incompatíveis. Como já vimos, se isso ocorre, torna-se impossível achar autoestados simultâneos de \hat{X}_m e de \hat{P}_n . Desta ideia, para dois observáveis \hat{A} e \hat{B} quaisquer, temos

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 = \langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle \geq |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2, \quad (3.42)$$

em específico para os operadores \hat{X} e \hat{P}_x , temos o **Princípio da Incerteza de Heisenberg** expresso em

$$\sigma_X^2 \sigma_P^2 = \langle (\Delta\hat{X})^2 \rangle \langle (\Delta\hat{p}_x)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (3.43)$$

3.2.2 Operador de Translação para Translações Finitas

Definimos o operador de translação considerando apenas translações infinitesimais; no entanto, se considerarmos uma sucessão de translações infinitesimais, obteremos no fim uma translação finita. Consideremos então uma translação finita exclusivamente na direção do versor \hat{x} , por uma distância Δx_i , temos

$$\hat{\mathcal{T}}(\Delta x_i \hat{x}) |\mathbf{x}_i\rangle = |\mathbf{x}_i + \Delta x_i \hat{x}\rangle. \quad (3.44)$$

Para uma composição de N translações infinitesimais de comprimento $\Delta x_i/N$ na direção \hat{x} , e tomando o limite $N \rightarrow \infty$, obtemos

$$\hat{\mathcal{T}}(\Delta x_i \hat{x}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\hat{1} - \frac{i\hat{P}_x}{N\hbar} \Delta x_i \right)^N = \exp\left(-\frac{i\hat{P}_x}{\hbar} \Delta x_i\right), \quad (3.45)$$

no qual utilizamos um dos limites fundamental do cálculo:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{y}{x}\right)^x = e^y. \quad (3.46)$$

Portanto, pra qualquer operador \hat{X} , podemos expandir a exponencial em termos de uma **série de potências**,⁷ da seguinte forma:

$$e^{\hat{X}} \equiv \sum_{y=0}^{\infty} \frac{\hat{X}^y}{y!} = \hat{1} + \hat{X} + \frac{\hat{X}^2}{2!} \dots \quad (3.47)$$

Experimentalmente, é possível medir o momento de uma partícula ao longo de três eixos ortogonais, ou seja, aplicações sucessivas de translações em diferentes direções, nos permitem obter informações precisas acerca das medidas[4]. Logo,

$$[\hat{P}_m, \hat{P}_n] = 0. \quad (3.48)$$

Consequentemente, temos:

$$|\mathbf{P}_i\rangle \equiv |p_{x_i}, p_{y_i}, p_{z_i}\rangle, \quad (3.49)$$

o que nos leva a

$$\hat{P}_x |\mathbf{p}_i\rangle = p_x |\mathbf{p}_i\rangle, \quad (3.50)$$

$$\hat{P}_y |\mathbf{p}_i\rangle = p_y |\mathbf{p}_i\rangle, \quad (3.51)$$

⁷ Consulte mais sobre série de potencias em [18].

e

$$\hat{P}_z|\mathbf{p}_i\rangle = p_z|\mathbf{p}_i\rangle. \quad (3.52)$$

Podemos ainda afirmar que $|\mathbf{p}_i\rangle$ é, diferentemente de $|\mathbf{x}_i\rangle$, autovetor de $\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)$, pois

$$\hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)|\mathbf{p}_i\rangle = \left(\hat{1} - \frac{i\hat{\mathbf{P}}}{\hbar}d\mathbf{x}_i\right)|\mathbf{p}_i\rangle = \left(\hat{1} - \frac{i\hat{\mathbf{P}}_i}{\hbar}d\mathbf{x}_i\right)|\mathbf{p}_i\rangle. \quad (3.53)$$

Notemos que o autovetor é o mesmo, mas ele sofre uma pequena mudança de fase[4]. Deste modo,

$$[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathcal{S}}(d\mathbf{x}_i)] = 0. \quad (3.54)$$

3.3 Função de Onda no Espaço das Posições

Na descrição de Schrödinger da mecânica quântica, a função de onda descreve o estado quântico do sistema de uma ou mais partículas[1, 8]; mas na descrição de Dirac, a função de onda é derivada de um ket arbitrário $|\alpha\rangle$. Por questão de simplicidade, e considerando apenas o caso unidimensional, na notação de brás e de kets, ela pode ser dada por

$$\psi_\alpha(x_i) = \langle x_i|\alpha\rangle. \quad (3.55)$$

Os autovetores de base de $|\alpha\rangle$, são justamente os kets de posição, que satisfazem

$$\hat{X}|x_i\rangle = x_i|x_i\rangle. \quad (3.56)$$

Para o caso de espectros contínuos, um ket que representa um estado físico pode ser expandido em termos da base $|x_i\rangle$, como

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i|x_i\rangle\langle x_i|\alpha\rangle. \quad (3.57)$$

O coeficiente $\langle x_i|\alpha\rangle$ é interpretado de tal forma que

$$|\langle x_i|\alpha\rangle|^2 dx_i \quad (3.58)$$

significa a probabilidade da partícula ser encontrada no entorno $[x_i - dx_i, x_i + dx_i]$. De acordo com a (3.55), este coeficiente de expansão nada mais é do que a **função de onda no espaço das posições** para o estado $|\alpha\rangle$ [4].

Considere o produto interno $\langle\beta|\alpha\rangle$, tal que

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i\langle\beta|x_i\rangle\langle x_i|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i\psi_\beta^*(x_i)\psi_\alpha(x_i). \quad (3.59)$$

Portanto, podemos interpretar $\langle \beta | \alpha \rangle$ como sendo a amplitude de probabilidade do estado $|\alpha\rangle$ ser encontrado no estado $|\beta\rangle$.

Analisemos agora a expansão

$$|\alpha\rangle = \sum_{a_i} |a_i\rangle \langle a_i | \alpha \rangle, \quad (3.60)$$

usando os conceitos de função de onda. Realizemos o produto interno $\langle x_i | \alpha \rangle$, temos então:

$$\langle x_i | \alpha \rangle = \sum_{a_i} \langle x_i | a_i \rangle \langle a_i | \alpha \rangle, \quad (3.61)$$

o que leva a

$$\psi_\alpha(x_i) = \sum_{a_i} C_{a_i} \phi_{a_i}(x_i), \quad (3.62)$$

no qual $\phi_{a_i}(x_i)$ é **autofunção** de \hat{A} com autovalor a_i . Logo,

$$\phi_{a_i}(x_i) = \langle x_i | a_i \rangle. \quad (3.63)$$

Analisemos agora $\langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle$, e observamos como este pode ser escrito em termos das funções de onda para os kets $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$. Logo, obtemos

$$\langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i dx_j \langle \beta | x_i \rangle \langle x_i | \hat{A} | x_j \rangle \langle x_j | \alpha \rangle, \quad (3.64)$$

o que leva a

$$\langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i dx_j \psi_\beta^*(x_i) \langle x_i | \hat{A} | x_j \rangle \psi_\alpha(x_j). \quad (3.65)$$

Notemos que a equação (3.65) torna-se interessante quando \hat{A} é função do operador \hat{X} . Em particular, consideremos o caso que

$$\hat{A} = \hat{X}^2, \quad (3.66)$$

temos então,

$$\langle x_i | \hat{X}^2 | x_j \rangle = x_i^2 \langle x_i | x_j \rangle = x_i^2 \delta(x_i - x_j). \quad (3.67)$$

Lembremos que os kets de base são normalizados de tal forma que a condição de ortogonalidade para espectros contínuos se torna

$$\langle x_i | x_j \rangle = \delta(x_i - x_j). \quad (3.68)$$

Portanto, a integral dupla na equação (3.65), se reduz a uma integral simples

$$\langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i dx_j \psi_{\beta}^*(x_i) \langle x_i | \hat{A} | x_j \rangle \psi_{\alpha}(x_j) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i \psi_{\beta}^*(x_i) x_i^2 \psi_{\alpha}(x_i), \quad (3.69)$$

em geral,

$$\langle \beta | \hat{F}(x) | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i \psi_{\beta}^*(x_i) f(x_i) \psi_{\alpha}(x_i). \quad (3.70)$$

3.3.1 Operador Momento na Base de Autovetores de Posição

Consideremos agora, como fica a forma do operador momento, quando os autovetores de posição são usados como kets de base. Partindo da definição de momento como gerador de translações infinitesimais[4], temos:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{S}}(\Delta x_i) &= \left(\hat{1} - \frac{i\hat{P}\Delta x_i}{\hbar} \right) | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i \hat{\mathcal{S}}(\Delta x_i) | x_i \rangle \langle x_i | \alpha \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i | x_i + \Delta x_i \rangle \langle x_i | \alpha \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i | x_i \rangle \langle x_i - \Delta x_i | \alpha \rangle, \end{aligned} \quad (3.71)$$

o que nos leva a

$$\left(\hat{1} - \frac{i\hat{P}\Delta x_i}{\hbar} \right) | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i | x_i \rangle \psi_{\alpha}(x_i - \Delta x_i). \quad (3.72)$$

Cabe-nos agora, analisar quem é $\psi_{\alpha}(x_i - \Delta x_i)$ em função de $\psi_{\alpha}(x_i)$. Notemos que pela **série de Taylor**⁸, temos

$$\psi(x_0 + \Delta x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n}{dx_0^n} \Delta x = \psi(x_0) + \psi'(x_0) \Delta x + \frac{1}{2!} \psi''(x_0) \Delta x^2 + \dots \quad (3.73)$$

Deste modo, considerando a aplicação da translação até a primeira ordem, ficamos com

$$\left(\hat{1} - \frac{i\hat{P}\Delta x_i}{\hbar} \right) | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i | x_i \rangle \left(\langle x_i | \alpha \rangle - i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \langle x_i | \alpha \rangle \Delta x_i \right). \quad (3.74)$$

Comparando ambos os lados, obtemos

$$\hat{P} | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i | x_i \rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \langle x_i | \alpha \rangle \right). \quad (3.75)$$

Temos também,

$$\langle x_j | \hat{P} | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i \langle x_j | x_i \rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \langle x_i | \alpha \rangle \right), \quad (3.76)$$

⁸ Consulte mais sobre Séries de Taylor no Cap. 5 de [18].

e pela propriedade de filtração da função delta de Dirac[18, 23], obtemos

$$\langle x_i | \hat{P} | \alpha \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \langle x_i | \alpha \rangle. \quad (3.77)$$

Para os elementos da matriz \hat{P} na base $\{|x_i\rangle\}$, temos

$$\langle x_j | \hat{P} | x_j \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \langle x_i | x_j \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \delta(x_i - x_j). \quad (3.78)$$

Agora da equação (3.75), obtemos a seguinte identidade:

$$\langle \beta | \hat{P} | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i \langle \beta | x_i \rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \langle x_i | \alpha \rangle \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i \psi_{\beta}^*(x_i) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \psi_{\alpha}(x_i). \quad (3.79)$$

Podemos notar, que o operador momento no espaço das posições é identificado como

$$\hat{P} \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}. \quad (3.80)$$

Aplicando a equação (3.77) repetidamente, chegamos a

$$\langle x_j | \hat{P}^n | \alpha \rangle = (-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x_i^n} \langle x_i | \alpha \rangle, \quad (3.81)$$

e

$$\langle \beta | \hat{P} | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i \psi_{\beta}^*(x_i) (-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x_i^n} \psi_{\alpha}(x_i). \quad (3.82)$$

3.4 Função de Onda no Espaço dos Momentos

Ainda trabalhando no espaço unidimensional, queremos agora trabalhar com a função de onda na base dos momentos. Sabemos que para o operador momento,

$$\hat{P} | p_i \rangle = p_i | p_i \rangle, \quad (3.83)$$

a (3.83) é satisfeita. Similarmente ao que foi dito com os autokets de posição, temos

$$\langle p_i | p_j \rangle = \delta(p_i - p_j). \quad (3.84)$$

Podemos também escrever um ket genérico $|\alpha\rangle$, como

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp_i | p_i \rangle \langle p_i | \alpha \rangle, \quad (3.85)$$

no qual os coeficientes de expansão $\langle p_i | \alpha \rangle$, nada mais é do que a **função de onda no espaço dos momentos**. Portanto,

$$\Phi_{\alpha}(p_i) = \langle p_i | \alpha \rangle. \quad (3.86)$$

Como esperado, temos que

$$|\Phi_\alpha(p_i)|^2 dp = |\langle p_i | \alpha \rangle|^2 dp, \quad (3.87)$$

pode ser interpretado como a probabilidade de que uma medida de \hat{P} , produza um autovalor p_i num intervalo p_i e $p_i + dp_i$.

Agora sendo $|\alpha\rangle$ normalizado, temos

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp_i \langle \alpha | p_i \rangle \langle p_i | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp_i \Phi_\alpha^*(p_i) \Phi_\alpha(p_i) = \int_{-\infty}^{\infty} dp_i |\Phi_\alpha(p_i)|^2 = 1. \quad (3.88)$$

Para o caso de mudança de representação, relativo ao caso discreto, tínhamos a relação dada por uma matriz de transformação em (2.212). Para estabelecer uma relação entre a representação x e a representação p , consideremos os elementos $\langle x_i | p_i \rangle$ [4]. Da equação (3.77), temos

$$\langle x_i | \hat{P} | p_i \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \langle x_i | p_i \rangle, \quad (3.89)$$

o que nos leva a

$$p_i \langle x_i | p_i \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \langle x_i | p_i \rangle. \quad (3.90)$$

A solução desta equação diferencial é dada por

$$\langle x_i | p_i \rangle = N \cdot \exp\left(\frac{ip_i x_i}{\hbar}\right), \quad (3.91)$$

no qual N é a constante de normalização, que por convenção a temos como um número real puro e positivo. Notemos ainda, que a função de transformação $\langle x_i | p_i \rangle$, é uma função de duas variáveis com x_i e p_i . Se fixarmos apenas p_i , podemos interpretá-la como sendo a amplitude de probabilidade de se encontrar na posição x_i , um autovetor de momento especificado por p_i [4]. Em resumo, é a função de onda para o autovetor de momento $|p_i\rangle$, ou seja, a autofunção de momento no espaço das posições.

Para encontrar a constante de normalização N , consideremos

$$\langle x_i | x_j \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp_i \langle x_i | p_i \rangle \langle p_i | x_j \rangle, \quad (3.92)$$

o que leva a

$$\delta(x_i - x_j) = |N|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dp_i e^{\frac{ip_i(x_i - x_j)}{\hbar}} = 2\pi |N|^2 \delta(x_i - x_j), \quad (3.93)$$

no qual utilizamos a seguinte propriedade

$$\delta(x - \alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ip(x-\alpha)} dp. \quad (3.94)$$

Da equação (3.93), obtemos

$$N = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \quad (3.95)$$

Portanto, substituindo a equação (3.95) na equação (3.91), chegamos a

$$\langle x_i | p_i \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ip_i x_i}{\hbar}\right). \quad (3.96)$$

Diante de tudo isso, agora podemos demonstrar a relação que há entre a função de onda no espaço da posição e a função de onda no espaço do momento. Logo, para fazermos transformações entre as bases $\{|x_i\rangle\}$ e $\{|p_i\rangle\}$, temos:

$$\langle x_i | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp_i \langle x_i | p_i \rangle \langle p_i | \alpha \rangle, \quad (3.97)$$

e

$$\langle p_i | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i \langle p_i | x_i \rangle \langle x_i | \alpha \rangle. \quad (3.98)$$

O que nos fornece a função de onda no espaço das posições e a função de onda no espaço dos momentos respectivamente,

$$\psi_\alpha(x_i) = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right] \int_{-\infty}^{+\infty} dp_i e^{\frac{ip_i x_i}{\hbar}} \Phi_\alpha(p_i), \quad (3.99)$$

e

$$\Phi_\alpha(p_i) = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right] \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i e^{\frac{-ip_i x_i}{\hbar}} \psi_\alpha(x_i). \quad (3.100)$$

Notemos que a função de onda no espaço das posições é a **transformada de Fourier**⁸ da função de onda no espaço dos momentos; já $\Phi_\alpha(p_i)$, é a **transformada de Fourier inversa** de $\psi_\alpha(x_i)$, no qual a diferença decorre do sinal do expoente[4, 8].

3.5 Generalização para o Espaço Tridimensional

Foi trabalhado estes aspectos da teoria nas últimas seções, exclusivamente considerando o espaço unidimensional. No entanto, é importante generalizar as equações já discutidas

⁸ Consulte mais sobre as transformadas de Fourier em [18].

no espaço tridimensional, realizando as mudanças necessárias. Os kets de base, sejam de posição ou momento satisfazem respectivamente:

$$\hat{X}|\mathbf{x}_i\rangle = \mathbf{x}_i|\mathbf{x}_i\rangle, \quad (3.101)$$

e

$$\hat{P}|\mathbf{p}_i\rangle = \mathbf{p}_i|\mathbf{p}_i\rangle, \quad (3.102)$$

no qual obedecem às seguintes condições de normalização

$$\langle \mathbf{x}_i | \mathbf{x}_j \rangle = \delta^3(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j), \quad (3.103)$$

e

$$\langle \mathbf{p}_i | \mathbf{p}_j \rangle = \delta^3(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j). \quad (3.104)$$

A relação de completeza, é dada por

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3x_i |\mathbf{x}_i\rangle \langle \mathbf{x}_i| = \hat{1}, \quad (3.105)$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3p_i |\mathbf{p}_i\rangle \langle \mathbf{p}_i| = \hat{1}, \quad (3.106)$$

no qual, para um ket de estado arbitrário, temos

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d^3x_i |\mathbf{x}_i\rangle \langle \mathbf{x}_i | \alpha \rangle, \quad (3.107)$$

e

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d^3p_i |\mathbf{p}_i\rangle \langle \mathbf{p}_i | \alpha \rangle, \quad (3.108)$$

no qual para os coeficientes de expansão, temos

$$\langle \mathbf{x}_i | \alpha \rangle = \psi_\alpha(\mathbf{x}_i), \quad (3.109)$$

e

$$\langle \mathbf{p}_i | \alpha \rangle = \Phi_\alpha(\mathbf{p}_i). \quad (3.110)$$

Generalizando a (3.79), para o caso tridimensional, temos

$$\langle \beta | \hat{P} | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x_i \psi_\beta^*(\mathbf{x}_i) (-i\hbar \nabla_i) \psi_\alpha(\mathbf{x}_i). \quad (3.111)$$

Já a função de transformação análoga a (3.96), fica

$$\langle \mathbf{x}_i | \mathbf{p}_i \rangle = \left[\frac{1}{2\pi\hbar} \right]^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{x}_i}{\hbar}\right). \quad (3.112)$$

Finalmente, as funções de onda, nos espaço das posições e no espaço dos momentos, são dadas respectivamente por

$$\psi_\alpha(\mathbf{x}_i) = \left[\frac{1}{2\pi\hbar} \right]^{\frac{3}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3 p_i \left[\exp\left(\frac{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{x}_i}{\hbar}\right) \right] \Phi_\alpha(\mathbf{p}_i), \quad (3.113)$$

e

$$\Phi_\alpha(\mathbf{p}_i) = \left[\frac{1}{2\pi\hbar} \right]^{\frac{3}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3 x_i \left[\exp\left(-\frac{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{x}_i}{\hbar}\right) \right] \psi_\alpha(\mathbf{x}_i). \quad (3.114)$$

3.6 Evolução Temporal e a Equação de Schrödinger

O que mostramos até aqui a respeito dos sistemas físicos, não consideramos a evolução dinâmica dos kets, ou seja, em resumo, no qual os sistemas físicos evoluem no tempo. Desta forma, nosso objetivo agora é analisar como um ket de estado evolui no tempo.

3.6.1 Operador Evolução Temporal

Analogamente ao que foi feito com o operador de translação, há um operador que nos permite obter informações dos kets de estado[4]. Consideremos então, um ket de estado arbitrário $|\alpha\rangle$, num instante t_0 , denotamos o ket correspondente ao estado em um tempo futuro por

$$|\alpha, t_0, t\rangle, \quad (3.115)$$

no qual o sistema evolui de t_0 para t .

Em resumo, nosso objetivo é saber como o sistema muda por um deslocamento temporal $t_0 \rightarrow t$. Analogamente ao operador de translação, vamos assumir que é o operador de evolução temporal o responsável por tal evolução. Deste modo, temos

$$\hat{\mathcal{U}}(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle = |\alpha, t_0, t\rangle. \quad (3.116)$$

O operador em questão, é munido de algumas propriedades importantes. A primeira delas é a unitariedade, consequência da conservação de probabilidades. Neste caso, se escrevermos $|\alpha, t_0\rangle$, como combinação dos kets $\{|a_i\rangle\}$, temos

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a_i} C_{a_i}(t_0)|a_i\rangle. \quad (3.117)$$

Para o estado evoluído, temos

$$|\alpha, t_0, t\rangle = \sum_{a_i} C_{a_i}(t) |a_i\rangle. \quad (3.118)$$

Em geral, esperamos que

$$|C_{a_i}(t_0)|^2 \neq |C_{a_i}(t)|^2. \quad (3.119)$$

Por outro lado, temos:

$$\sum_{a_i} |C_{a_i}(t_0)|^2 = \sum_{a_i} |C_{a_i}(t)|^2, \quad (3.120)$$

ou seja, a soma das probabilidades de se obter $|\alpha, t_0\rangle$, em um dos possíveis autokets de \hat{A} é 1.

Logo,

$$\langle \alpha, t_0 | \alpha, t_0 \rangle = 1 \Rightarrow \langle \alpha, t_0, t | \alpha, t_0, t \rangle = 1. \quad (3.121)$$

Sendo então,

$$\langle \alpha, t_0 | \hat{\mathcal{U}}^\dagger(t, t_0) \hat{\mathcal{U}}(t, t_0) | \alpha, t_0 \rangle = 1, \quad (3.122)$$

nos leva a afirmar que a condição de unitariedade está satisfeita. Portanto,

$$\hat{\mathcal{U}}^\dagger(t, t_0) \hat{\mathcal{U}}(t, t_0) = \hat{1}. \quad (3.123)$$

Uma outra propriedade fundamental deste operador, é a propriedade de composição:

$$\hat{\mathcal{U}}(t_2, t_0) = \hat{\mathcal{U}}(t_2, t_1) \hat{\mathcal{U}}(t_1, t_0), \quad (3.124)$$

ou seja, obter a evolução temporal de t_0 a t_2 , é equivalente a obter primeiro a evolução temporal de t_0 a t_1 , e depois de t_1 a t_2 .

Consideremos um operador de evolução temporal infinitesimal $\hat{U}(t_0 + dt, t_0)$:

$$|\alpha, t_0, t_0 + dt\rangle = \hat{U}(t_0 + dt, t_0) |\alpha, t_0\rangle, \quad (3.125)$$

uma outra propriedade importante é a redução a identidade. Logo,

$$\lim_{dt \rightarrow 0} \hat{\mathcal{U}}(t_0 + dt, t_0) = \hat{1}. \quad (3.126)$$

Diante destas propriedades, o operador infinitesimal de evolução temporal tem o seguinte formato:

$$\hat{\mathcal{U}}(t_0 + dt, t_0) = \hat{1} - \hat{\Omega} dt, \quad (3.127)$$

no qual $\hat{\Omega}$ é um operador hermitiano. Portanto,

$$\hat{\Omega}^\dagger = \hat{\Omega}. \quad (3.128)$$

É de se esperar que $\hat{\mathcal{U}}(t_0 + dt, t_0)$ seja adimensional, e isso nos leva a afirmar que $\hat{\Omega}$ tem dimensão de frequência ou de inverso de tempo[4]. Deste modo, assim como fizemos uma relação entre \hat{K} e o momento, usando a equação de de broglie para o operador de translação, faremos algo semelhante para o operador de evolução temporal. Logo, pela relação de Planck-Einstein[12][24], a frequência ω está relacionada a energia E por:

$$E = \hbar\omega. \quad (3.129)$$

Para este caso então, é o hamiltoniano que é o gerador de evolução temporal[22]. Portanto, agora relacionamos $\hat{\Omega}$ com o hamiltoniano \hat{H} da seguinte forma:

$$\hat{\Omega} = \frac{\hat{H}}{\hbar}. \quad (3.130)$$

Em síntese, o operador evolução temporal infinitesimal pode ser escrito em termos do hamiltoniano como:

$$\hat{\mathcal{U}}(t_0 + dt, t_0) = \hat{1} - \frac{\hat{H}}{\hbar}dt, \quad (3.131)$$

no qual \hat{H} , é obviamente hermitiano.

3.6.2 Equação de Schrödinger

Queremos agora, a partir do que foi mostrado, deduzir uma equação diferencial para o operador de evolução temporal $\hat{\mathcal{U}}(t, t_0)$. Para tal, exploremos a propriedade de composição:

$$\hat{\mathcal{U}}(t + dt, t_0) = \hat{\mathcal{U}}(t + dt, t)\hat{\mathcal{U}}(t, t_0), \quad (3.132)$$

o que nos leva a

$$\hat{\mathcal{U}}(t + dt, t_0) = \left(\hat{1} - \frac{\hat{H}}{\hbar}dt\right)\hat{\mathcal{U}}(t, t_0), \quad (3.133)$$

no qual a diferença $t - t_0$, não necessita ser precisamente infinitesimal. Temos então:

$$\hat{\mathcal{U}}(t + dt, t_0) - \hat{\mathcal{U}}(t, t_0) = -\frac{\hat{H}}{\hbar}dt\hat{\mathcal{U}}(t, t_0), \quad (3.134)$$

que ao reajustar os termos, chegamos a seguinte equação diferencial:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\mathcal{U}}(t, t_0) = \hat{H}\hat{\mathcal{U}}(t, t_0). \quad (3.135)$$

Com a (3.135), chegamos então a equação de Schrödinger para o operador evolução temporal.

Multipliquemos a (3.135), em ambos os lados por $|\alpha, t_0\rangle$ à direita, temos:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\hat{\mathcal{U}}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle] = \hat{H} [\hat{\mathcal{U}}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle], \quad (3.136)$$

o que nos leva a

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t, t_0\rangle = \hat{H} |\alpha, t, t_0\rangle. \quad (3.137)$$

Se conhecemos $\hat{\mathcal{U}}(t, t_0)$ e como ele atua sobre um ket de estado inicial, não é preciso se preocupar com a equação de Schrödinger para o ket em (3.137). Tudo o que se precisa, é aplicar $\hat{\mathcal{U}}(t, t_0)$ em $|\alpha, t_0\rangle$, e obter um ket de estado para um tempo t qualquer[4]. Deste modo, o objetivo principal consiste em obter as soluções formais de (3.135). Temos três casos a se considerar:

Caso 1: O Hamiltoniano é independente do tempo.

Neste caso, mesmo quando o parâmetro t varia, \hat{H} , permanece inalterado. Deste modo, a solução de (3.135) é dado por:

$$\hat{\mathcal{U}}(t, t_0) = \exp\left(\frac{-i\hat{H}(t - t_0)}{\hbar}\right). \quad (3.138)$$

Caso 2: O Hamiltoniano é dependente do tempo, mas os \hat{H} 's para diferentes tempos comutam.

Neste caso, a solução de (3.135) é dado por:

$$\hat{\mathcal{U}}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t') dt'\right). \quad (3.139)$$

Caso 3: O Hamiltoniano é dependente do tempo, mas os \hat{H} 's para diferentes tempos não comutam entre si.

Neste caso, a solução de (3.135) é dada por:

$$\hat{\mathcal{U}}(t, t_0) = \hat{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) \prod_{j=2}^n \int_{t_0}^{t_{j-1}} dt_j \hat{H}(t_j). \quad (3.140)$$

3.6.3 Autokets de Energia

Queremos agora calcular o efeito do operador de evolução temporal em um ket inicial geral $|\alpha\rangle$. Vamos considerar um conjunto de kets de base $\{|a_i\rangle\}$, que são autokets de um operador \hat{A} , tal que

$$[\hat{A}, \hat{H}] = 0. \quad (3.141)$$

Como \hat{A} e \hat{H} comutam, os autokets de \hat{A} são também autokets de \hat{H} , chamados de **Autokets de Energia**. Pela equação de autovetores e autovalores, temos

$$\hat{H}|a_i\rangle = E_{a_i}|a_i\rangle, \quad (3.142)$$

no qual E_{a_i} são os autovalores de \hat{H} , com os autokets $|a_i\rangle$.

Note que tomando $t_0 = 0$, temos

$$\hat{\mathcal{U}}(t,0) = \exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right) = \sum_{a_i} \sum_{a_j} |a_i\rangle \langle a_i| \exp\left(\frac{-i\hat{H}(t)}{\hbar}\right) |a_j\rangle \langle a_j|. \quad (3.143)$$

Mas pela expansão de Taylor, temos:

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right)|a_i\rangle &= \left(\hat{1} - \frac{-i\hat{H}t}{\hbar} - \frac{-i\hat{H}^2t^2}{\hbar} + \dots\right)|a_i\rangle \\ &= \left(\hat{1} - \frac{-iE_{a_i}t}{\hbar} - \frac{-iE_{a_i}^2t^2}{\hbar} + \dots\right)|a_i\rangle \\ &= \exp\left(\frac{-iE_{a_i}t}{\hbar}\right)|a_i\rangle, \end{aligned} \quad (3.144)$$

Logo,

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{U}}(t,0) &= \sum_{a_i} \sum_{a_j} |a_i\rangle \langle a_i| \exp\left(\frac{-i\hat{H}(t)}{\hbar}\right) |a_j\rangle \langle a_j| \\ &= \sum_{a_i} \sum_{a_j} \exp\left(\frac{-iE_{a_i}t}{\hbar}\right) |a_i\rangle \langle a_i| a_j\rangle \langle a_j| \\ &= \sum_{a_i} \sum_{a_j} \exp\left(\frac{-iE_{a_i}t}{\hbar}\right) |a_i\rangle \langle a_i|. \end{aligned} \quad (3.145)$$

Com isso, podemos resolver qualquer problema de valores iniciais, desde que a expansão do ket inicial em termos do conjunto de kets $\{|a_i\rangle\}$, seja conhecida[4]. Para exemplificar, suponhamos que a expansão do ket inicial seja dado por

$$|\alpha, t_0 = 0\rangle = \sum_{a_i} |a_i\rangle \langle a_i|\alpha\rangle = \sum_{a_i} C_{a_i}(t_0)|a_i\rangle. \quad (3.146)$$

Temos que o ket evoluído é dado por

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0 = 0\rangle &= \hat{\mathcal{U}}(t, t_0)|\alpha, t_0 = 0\rangle = \sum_{a_i} \exp\left(\frac{-iE_{a_i}t}{\hbar}\right) |a_i\rangle \langle a_i|\alpha\rangle \\ &= \sum_{a_i} C_{a_i}(t_0) \exp\left(\frac{-iE_{a_i}t}{\hbar}\right) |a_i\rangle. \end{aligned} \quad (3.147)$$

Desta forma, concluimos que o coeficiente de expansão varia com o tempo:

$$C_{a_i}(t) = C_{a_i}(t_0) \exp\left(\frac{-iE_{a_i}t}{\hbar}\right). \quad (3.148)$$

3.6.4 Dependência Temporal dos Valores Esperados

Suponhamos agora que em $t = 0$, o estado inicial seja um dos autokets de um observável \hat{A} que comuta com \hat{H} . Queremos analisar agora, como os valores esperados de um observável \hat{B} , que não necessariamente comuta com \hat{A} ou com \hat{H} , varia em função do tempo[4]. Para um tempo posterior temos,

$$|a_i, t_0 = 0, t\rangle = \hat{\mathcal{U}}(t, 0)|a_i\rangle. \quad (3.149)$$

Logo, $\langle \hat{B} \rangle$ é dado por

$$\begin{aligned} \langle \hat{B} \rangle &= \langle a_i(t) | \hat{B} | a_i(t) \rangle = \langle a_i | \hat{\mathcal{U}}^\dagger(t) \hat{B} \hat{\mathcal{U}}(t) | a_i \rangle \\ &= \langle a_i | \exp\left(\frac{iE_{a_i}t}{\hbar}\right) \cdot \hat{B} \cdot \exp\left(\frac{-iE_{a_i}t}{\hbar}\right) | a_i \rangle \\ &= \langle a_i | \hat{B} | a_i \rangle, \end{aligned} \quad (3.150)$$

que não tem uma dependência temporal. Portanto, o valor esperado de um observável não varia com o tempo quando calculado com relação a um autoket de energia; é neste sentido, que os autokets de energia são chamados de **Estados Estacionários**[4].

Agora se o valor esperado é calculado com relação a uma superposição de autokets de energia, ou um estado não estacionário, é de se esperar que a situação mude. Seja,

$$|\alpha, t_0 = 0\rangle = \sum_{a_i} C_{a_i}(t_0) |a_i\rangle. \quad (3.151)$$

Neste caso, temos:

$$\begin{aligned} \langle \hat{B} \rangle &= \langle a_i(t) | \hat{B} | a_i(t) \rangle = \langle a_i | \hat{\mathcal{U}}^\dagger(t) \hat{B} \hat{\mathcal{U}}(t) | a_i \rangle \\ &= \left[\sum_{a_i} C_{a_i}^\dagger(t_0) \langle a_i | \exp\left(\frac{iE_{a_i}t}{\hbar}\right) \right] \cdot \hat{B} \cdot \left[\sum_{a_j} C_{a_j}(t_0) \exp\left(\frac{-iE_{a_j}t}{\hbar}\right) | a_j \rangle \right] \\ &= \sum_{a_i} \sum_{a_j} C_{a_i}^\dagger(t_0) C_{a_j}(t_0) \langle a_i | \hat{B} | a_j \rangle \\ &= \exp\left(\frac{-i(E_{a_j} - E_{a_i})t}{\hbar}\right). \end{aligned} \quad (3.152)$$

Notamos agora que o valor esperado consiste em termos oscilantes no qual as frequências angulares são determinadas pela condição de Bohr sobre as frequências:

$$\omega_{a_j a_i} = \frac{(E_{a_j} - E_{a_i})}{\hbar}. \quad (3.153)$$

4 FORMALISMO DO OPERADOR DE TRANSLAÇÃO DEPENDENTE DA POSIÇÃO

A partir de agora, discutiremos resumidamente o formalismo do operador translação dependente da posição (PDTO), uma teoria desenvolvida a partir de primeiros princípios, com o objetivo de estudar as propriedades quânticas quando há uma quebra de simetria de translação. Para este trabalho, o objetivo será, a partir do trabalho de Braga[6], entender quais os efeitos dessa quebra de simetria de translação, quando causada pela métrica do espaço na teoria quântica[6]. Para isso, generalizaremos o espaço das posições, ou seja, o espaço agora a se considerar não mais é euclidiano, mas sim riemanniano.

4.1 Formalismo PDTO Unidimensional

Segundo Riemann, a geometria se fundamenta em dois fatos[25]. O primeiro deles consiste no fato de que o espaço tridimensional é contínuo, e um ponto P pode ser descrito pelo sistema de três valores de coordenadas q_1, q_2 e q_3 . Sendo então $P = (q_1, q_2, q_3)$, em um ponto neste espaço, consideremos a seguinte transformação:

$$\begin{aligned}x &= x(q_1, q_2, q_3), \\y &= y(q_1, q_2, q_3), \\z &= z(q_1, q_2, q_3),\end{aligned}\tag{4.1}$$

que nos leva a

$$\begin{aligned}dx &= \sum_{i=1}^3 \frac{\partial x}{\partial q_i} dq_i, \\dy &= \sum_{i=1}^3 \frac{\partial y}{\partial q_i} dq_i, \\dz &= \sum_{i=1}^3 \frac{\partial z}{\partial q_i} dq_i.\end{aligned}\tag{4.2}$$

O segundo fato da geometria, segundo Riemann, consiste que o quadrado da distância ds^2 de dois pontos infinitamente próximos $P = (q_1, q_2, q_3)$ e $P' = (q_1 + dq_1, q_2 + dq_2, q_3 + dq_3)$ é uma forma quadrática das coordenadas relativas dq_i [4],

$$ds^2 = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 g_{ij} dq_i dq_j,\tag{4.3}$$

no qual $g_{ij} = g_{ji}$. Notemos que por (4.2), temos

$$d\vec{r} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i} dq_i.\tag{4.4}$$

O produto $d\vec{r} \cdot d\vec{r}$ é dado por

$$d\vec{r} \cdot d\vec{r} = ds^2 = \sum_{i=1} \sum_{j=1} \left(\frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_j} \right) dq_i dq_j. \quad (4.5)$$

Comparando a equação (4.5) com a equação (4.3), temos

$$g_{ij} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_j}, \quad (4.6)$$

no qual podemos representar g_{ij} por uma matriz quadrada:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

e no qual g_{ij} é conhecido como **Tensor Métrico** ou simplesmente **Métrica**⁹. A métrica do espaço vai fornecer a informação de como é a descrição geométrica deste espaço. Mas em resumo, pela equação (4.3), podemos afirmar que o espaço é um contínuo métrico[6].

Como foi dito anteriormente, não nos foi restringindo ficar apenas no espaço euclidiano, que é um caso particular do espaço de Riemann, já que

$$g_{ij} = \delta_{ij}; \quad (4.8)$$

Além disso, o quadrado da distância ds^2 entre dois pontos infinitamente próximos P e P', no espaço euclidiano é dado por

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2. \quad (4.9)$$

Trataremos inicialmente, por questão de simplicidade, apenas o caso unidimensional do formalismo PDTO. A princípio, postulamos que o espaço das posições é o espaço de Riemann unidimensional, que agora poderá ser escrito de forma contínua pelo sistema de valores de uma única coordenada x [6]. Deste modo, o quadrado da distância entre dois pontos $P(x)$ e $P'(x+dx)$, infinitamente próximos, pode ser dado por

$$ds^2 = g(x)dx^2. \quad (4.10)$$

Para o espaço das funções de onda, o espaço de Hilbert \mathcal{H} , definimos que em um certo intervalo $[a, b]$, ele será dotado de um peso associado pela métrica do espaço[6]:

$$\int_a^b |\psi(x)|^2 \sqrt{g(x)} dx < \infty, \quad (4.11)$$

⁹ Para um aprofundamento em coordenadas curvilíneas, consulte [18, 19]

no qual este espaço é munido de um produto interno,

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int_a^b \phi(x)^* \psi(x) \sqrt{g(x)} dx. \quad (4.12)$$

Notemos que o espaço de Riemann é um espaço real em que a partícula se move; já o espaço de Hilbert, é um espaço puramente abstrato, um recurso matemático da teoria.

Da definição acima, segue as seguintes propriedades:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^* \quad (4.13)$$

$$\langle \phi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle \quad (4.14)$$

$$\langle \lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2 | \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \phi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \phi_2 | \psi \rangle \quad (4.15)$$

Dado agora duas funções $\psi(x)$ e $\phi(x)$, elas são ditas ortogonais se

$$\langle \psi(x) | \phi(x) \rangle = 0. \quad (4.16)$$

Por outro lado, a norma $\|\psi(x)\|$ é definida como

$$\|\psi(x)\| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (4.17)$$

que deve ser positiva-definida.

Para uma partícula bem localizada em torno de um ponto $P(x)$, e descrito pelo ket $|x\rangle$, a equação de autovalores e autovetores fica,

$$\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle. \quad (4.18)$$

Levando em consideração agora a métrica do espaço, generalizemos e observemos como fica a forma do operador identidade para o espaço das posições. Considerando que $\phi^*(x) = \langle \phi | x \rangle$ e $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$, pela equação (4.12), temos

$$\begin{aligned} \langle \phi | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \phi | x \rangle \langle x | \psi \rangle \sqrt{g(x)} dx \\ &= \langle \phi | \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{g(x)} dx |x\rangle \langle x| \right] | \psi \rangle, \end{aligned} \quad (4.19)$$

o que leva a

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{g(x)} dx |x\rangle \langle x| = \hat{1}. \quad (4.20)$$

Desta forma, um ket de estado físico arbitrário $|\psi\rangle$, expandido em termos dos kets de base $\{|x\rangle\}$, fica

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{g(x)} dx |x\rangle \langle x|\psi\rangle. \quad (4.21)$$

Outro ponto a se considerar é a forma que o produto interno dos autokets do operador posição irá tomar. Para isso, notemos que

$$\begin{aligned} \phi(x_i) = \langle x_i|\phi\rangle &= \langle x_i| \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{g(x)} dx |x\rangle \langle x| \right] |\phi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{g(x)} \langle x_i|x\rangle \langle x|\phi\rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{g(x)} \langle x_i|x\rangle \phi(x) dx. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Mas pela propriedade da filtração da integral de Dirac:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - x_i) dx = f(x_i). \quad (4.23)$$

Deste modo, afirmamos que

$$\sqrt{g(x)} \langle x_i|x\rangle \phi(x) = \psi(x) \delta(x - x_i), \quad (4.24)$$

portanto,

$$\langle x_i|x\rangle = g^{-1/2}(x) \delta(x - x_i). \quad (4.25)$$

Generalizando a ideia de R.N.Costa Filho *et al.*[11], postulamos que o operador de translação $\hat{\mathfrak{S}}_g(dx)$, atua sobre um ket de estado $|x\rangle$ da seguinte forma[6]:

$$\hat{\mathfrak{S}}_g(dx)|x\rangle = |x + g^{-1/2}(x)dx\rangle. \quad (4.26)$$

Quando $g(x)$ for expresso da seguinte forma:

$$g^{-1/2}(x) = 1 + \gamma x, \quad (4.27)$$

espera-se os resultados obtidos por R.N.Costa *et al.*[11]; e como podemos notar, se

$$g(x) = 1 \quad (4.28)$$

recaímos na mecânica quântica tradicional para o espaço euclidiano.

Das equações (4.10) e (4.26), notamos que

$$\hat{\mathfrak{S}}_g(ds)|x\rangle = |x + dx\rangle. \quad (4.29)$$

O que nos mostra que para levar um estado $|x\rangle$ para um estado $|x + dx\rangle$ nesse espaço, não é necessário fazer apenas uma translação de comprimento dx , mas uma translação de comprimento ds [6].

Como consequência disso, o operador $\hat{\mathfrak{S}}_g$ não apresenta mais um caráter aditivo como antes. Para mostrar isso, consideremos que

$$\begin{aligned} \hat{\mathfrak{S}}_g(dx')\hat{\mathfrak{S}}_g(dx'')|x\rangle &= \hat{\mathfrak{S}}_g(dx')|x + g^{-1/2}(x)dx''\rangle \\ &= |x + g^{-1/2}(x)dx'' + g^{-1/2}(x + g^{-1/2}(x)dx'')dx'\rangle. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Por outro lado, temos

$$\begin{aligned} \hat{\mathfrak{S}}_g(dx' + dx'')|x\rangle &= |x + g^{-1/2}(x)(dx' + dx'')\rangle \\ &= |x + g^{-1/2}(x)dx'' + g^{-1/2}(x)dx'\rangle. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Notemos que $g(x)$ e $g(x + g^{-1/2}(x)dx'')$, geralmente não são equivalentes, podemos então concluir que

$$\hat{\mathfrak{S}}_g(dx')\hat{\mathfrak{S}}_g(dx'') \neq \hat{\mathfrak{S}}_g(dx' + dx''). \quad (4.32)$$

Portanto, comprovamos a não aditividade de $\hat{\mathfrak{S}}_g$.

Outra propriedade importante que se mantém a mesma é a da redução à identidade,

$$\lim_{dx \rightarrow 0} \hat{\mathfrak{S}}_g(dx) = \hat{1}. \quad (4.33)$$

Além disso, das equações (4.18) e (4.26), temos

$$\begin{aligned} [\hat{X}, \hat{\mathfrak{S}}_g(x)]|x\rangle &= (x + g^{-1/2}(x)dx)|x + g^{-1/2}(x)dx\rangle - x|x + g^{-1/2}(x)dx\rangle \\ &= g^{-1/2}(x)dx|x + g^{-1/2}(x)dx\rangle, \end{aligned} \quad (4.34)$$

no qual podemos fazer uma aproximação de até segunda ordem em dx , tal que

$$[\hat{X}, \hat{\mathfrak{S}}_g(x)]|x\rangle \approx g^{-1/2}(x)dx|x\rangle = g^{-1/2}(X)dx|x\rangle. \quad (4.35)$$

Considerando que o momento generalizado \hat{P}_g , é o gerador de translação, temos

$$\hat{\mathfrak{S}}_g(dx) \equiv \hat{1} - \frac{i\hat{P}_g dx}{\hbar}, \quad (4.36)$$

Deste modo, das equações (4.35) e (4.36), temos a nova relação de comutação entre os operadores posição e momento[6],

$$[\hat{X}, \hat{P}_g] = i\hbar g^{-1/2}(X). \quad (4.37)$$

Agora, vamos obter uma expressão para \hat{P}_g no espaço das posições. Para isso, consideremos a equação (4.36),

$$\hat{\mathcal{S}}_g(ds)|\psi\rangle = |\psi\rangle - \frac{i\hat{P}_g ds}{\hbar}|\psi\rangle, \quad (4.38)$$

no qual ds , definido como,

$$ds = \sqrt{g(x)}dx, \quad (4.39)$$

é muito pequeno.

Utilizando as equações (4.10) e (4.20), podemos reescrever a equação (4.38) da seguinte forma:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} ds_i \hat{\mathcal{S}}_g(ds)|x_i\rangle \langle x_i|\psi\rangle = |\psi\rangle - \frac{i\hat{P}_g ds}{\hbar}|\psi\rangle, \quad (4.40)$$

no qual $ds_i = \sqrt{g(x_i)}dx_i$. Agora da equação (4.26), temos

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} ds_i \hat{\mathcal{S}}_g(ds)|x_i + dx\rangle \langle x_i|\psi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} ds_i \hat{\mathcal{S}}_g(ds)|x_i\rangle \langle x_i - dx|\psi\rangle \\ &= |\psi\rangle - \frac{i\hat{P}_g ds}{\hbar}|\psi\rangle. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Agora se usarmos a relação aproximada de primeira ordem, obtida pela expansão de Taylor,

$$\langle x_i - dx|\psi\rangle \approx \langle x_i|\psi\rangle - ds \frac{\partial}{\partial s} \langle x_i|\psi\rangle, \quad (4.42)$$

na equação (4.41), obtemos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} ds_i \hat{\mathcal{S}}_g(ds)|x_i\rangle \left(\langle x_i|\psi\rangle - ds \frac{\partial}{\partial s} \langle x_i|\psi\rangle \right) = |\psi\rangle - \frac{i\hat{P}_g ds}{\hbar}|\psi\rangle. \quad (4.43)$$

Por fim, se aplicarmos $\langle x|$ à esquerda da equação (4.43), das equações (4.20) e (4.25) obtemos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} ds_i \langle x|x_i\rangle \frac{\partial}{\partial s} \langle x_i|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} ds_i \delta(x_i - x) \frac{\partial}{\partial s} \langle x_i|\psi\rangle = \frac{i}{\hbar} \langle x|\hat{P}_g|\psi\rangle, \quad (4.44)$$

o que leva a

$$\langle x|\hat{P}_g|\psi\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \langle x|\psi\rangle. \quad (4.45)$$

Portanto,

$$\langle x|\hat{P}_g|\psi\rangle = -i\hbar g^{-1/2}(x) \frac{d}{dx} \langle x|\psi\rangle, \quad (4.46)$$

no qual a equação (4.46), é a expressão desejada para o espaço das posições. Deste modo, o momento generalizado é dado por[6]

$$\hat{P}_g = -i\hbar\hat{D}_g, \quad (4.47)$$

no qual temos,

$$\hat{D}_g = g^{-1/2}(x)\frac{d}{dx}. \quad (4.48)$$

O operador momento \hat{P}_g é hermitiano no espaço de Hilbert com um peso[6], definido pelas equações (4.11) e (4.12).

Demonstração:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{P}_g | \psi \rangle &= \langle \phi | \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{g(x)} dx | x \rangle \langle x | \hat{P}_g | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{g(x)} dx \phi^*(x) \left(-i\hbar g^{-1/2}(x) \frac{d}{dx} \langle x | \psi \rangle \right) \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi^*(x) \frac{d}{dx} \psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) dx. \end{aligned} \quad (4.49)$$

Notamos que pela na equação (4.49), \hat{P}_g atua no espaço de Hilbert com um peso da mesma forma que $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ atua no espaço de Hilbert[6].

Realizando uma integração por partes em (4.49), e supondo que o produto $\phi^*(x)\psi(x)$, assume o mesmo valor nos limites de integração, temos

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{P}_g | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \left(i\hbar \frac{d}{dx} \right) \phi^*(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{g(x)} \psi(x) i\hbar \frac{1}{\sqrt{g(x)}} \frac{d}{dx} \phi^*(x) dx \\ &\left[\int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{g(x)} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{1}{\sqrt{g(x)}} \frac{d}{dx} \right) \phi(x) \right]^* = \langle \psi | \hat{P}_g | \phi \rangle^*. \end{aligned} \quad (4.50)$$

No espaço das posições, a equação de Schrödinger dependente do tempo é dada por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x | \Psi(t) \rangle = \langle x | \hat{H}_g | \Psi(t) \rangle. \quad (4.51)$$

Considerando que o Hamiltoniano generalizado é dado por

$$\hat{H}_g = \frac{\hat{P}_g^2}{2m} + V(x,t), \quad (4.52)$$

então temos,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{D}_g \Psi(x,t) + V(x,t) \Psi(x,t). \quad (4.53)$$

Supondo agora que o potencial V não dependa do parâmetro tempo, ou seja, $V = V(x)$, podemos buscar um conjunto de soluções particulares para a (4.53), tal que

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\Theta(t). \quad (4.54)$$

Substituindo a equação (4.54) na equação (4.53), temos

$$i\hbar \frac{1}{\Theta(t)} \frac{d}{dt} \Theta(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \hat{D}_g \psi(x) + V(x). \quad (4.55)$$

Notemos que no lado esquerdo da equação (4.55), temos uma equação diferencial ordinária de primeira ordem que depende só de t; do mesmo modo à direita, com a diferença que é uma equação diferencial de segunda ordem e que depende apenas da posição. Deste modo, para a continuidade da validade da equação (4.55), é necessário que os dois lados da equação referida, sejam constantes[6]. Deste modo,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \hat{D}_g \psi(x) + V(x) = E, \quad (4.56)$$

e

$$i\hbar \frac{1}{\Theta(t)} \frac{d}{dt} \Theta(t) = E. \quad (4.57)$$

A solução da equação diferencial na equação (4.57), é dada por

$$\Theta(t) = \exp\left(-\frac{iE}{\hbar}t\right). \quad (4.58)$$

Da equação (4.56), temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \hat{D}_g \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x), \quad (4.59)$$

ou ainda,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{g(x)}} \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{\sqrt{g(x)}} \frac{d}{dx} \psi(x) \right] + V(x) \psi(x) = E \psi(x), \quad (4.60)$$

no qual E, a constante de separação, é a energia da partícula.

A mecânica quântica tradicional, no qual usualmente está apresentada nos livros textos[1, 4, 8], é um caso particular do conjunto de resultados que têm pôr condição, $g(x) = 1$. Nos referimos então ao formalismo do operador de translação dependente da posição quando nos referimos a estes conjuntos de resultados[6].

4.2 Consequências Físicas do Formalismo PDTO

Agora discutiremos algumas consequências físicas do formalismo do operador de translação dependente da posição. Em um primeiro momento, mostraremos que a evolução temporal é determinística, ou seja, quando conhecemos o estado inicial $|\psi(t_0)\rangle$ do sistema

considerado, podemos determinar exatamente um estado posterior qualquer $|\psi(t)\rangle$ para todo e qualquer $t > t_0$ [6]. Também iremos generalizar o teorema de Ehrenfest, que na mecânica quântica tradicional[1, 4, 8], para os valores médios dos observáveis físicos, a mecânica quântica recai na mecânica clássica. No entanto, em um espaço não-euclidiano, veremos que o formalismo PDTO, para os valores médios dos observáveis físicos, recai aparentemente na mecânica clássica em um referencial-não inercial.

4.2.1 Determinismo da Evolução Temporal

A evolução temporal é determinística, no sentido que se conhecermos o estado inicial $|\psi(t_0)\rangle$ do sistema, podemos determinar exatamente o estado final $|\psi(t)\rangle$, para todo $t > t_0$. Em seguida, veremos que a evolução temporal é unitária, ou seja, conserva a sua norma.

Notemos ainda, que mesmo após a mudança do operador momento, devido a não aditividade de $\hat{\mathfrak{S}}_g$, a equação de Schrodinger, equação (4.53), continua sendo uma equação diferencial de primeira ordem em t , linear e homogênea. Com isso, há a garantia de se determinar precisamente a evolução dos sistemas físicos, ou seja, dada uma condição inicial $|\psi(t_0)\rangle$, o estado posterior $|\psi(t)\rangle$, fica unicamente determinado[6]. Deste modo, se $\Psi(x, t) = \langle x|\psi(t)\rangle$ é dado por

$$\Psi(x, t) = \hat{\mathcal{U}}(t, t_0)\Psi(x, t_0), \quad (4.61)$$

no qual $\hat{\mathcal{U}}(t, t_0)$ é o operador evolução temporal, e se a hamiltoniana \hat{H}_g não for dependente do tempo, então o operador de evolução temporal é da forma:

$$\hat{\mathcal{U}}(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_g(t - t_0)\right]. \quad (4.62)$$

Demonstração:

Para realizar esta demonstração, seguiremos duas etapas: a primeira consiste em mostrar que $\hat{\mathcal{U}}(t, t_0)$ satisfaz uma equação do tipo de Schrödinger; já a segunda etapa, consiste em mostrar que a equação (4.62) é uma solução desta equação[6]. Logo, substituindo a equação (4.61) na equação (4.53), e considerando que o potencial só depende da posição, obtemos

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}[\hat{\mathcal{U}}(t, t_0)\Psi(x, t_0)] = -\frac{\hbar^2}{2m}\hat{D}_g[\hat{\mathcal{U}}(t, t_0)\Psi(x, t_0)] + V(x, t)[\hat{\mathcal{U}}(t, t_0)\Psi(x, t_0)]. \quad (4.63)$$

Como $\Psi(x, t_0)$ independe do tempo t , reescrevemos a equação (4.63) como

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}[\hat{\mathcal{U}}(t, t_0)]\Psi(x, t_0) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{D}_g\hat{\mathcal{U}}(t, t_0) + V(x)\hat{\mathcal{U}}(t, t_0)\right]\Psi(x, t_0), \quad (4.64)$$

que é válida para toda e qualquer condição inicial $\Psi(x, t_0)$. Deste modo, temos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathcal{U}}(t, t_0) = -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{D}_g \hat{\mathcal{U}}(t, t_0) + V(x) \hat{\mathcal{U}}(t, t_0), \quad (4.65)$$

o que leva a

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathcal{U}}(t, t_0) = \hat{H}_g \hat{\mathcal{U}}(t, t_0), \quad (4.66)$$

que é a equação do tipo Schrödinger para o operador evolução temporal vista na equação (3.135).

Agora, como dissera antes, cabe mostrar que a equação (4.62) satisfaz a equação (4.66). Para isso, expandido-a em série de Taylor, obtemos

$$\hat{\mathcal{U}}(t, t_0) = \hat{1} - \frac{i\hat{H}_g(t-t_0)}{\hbar} + \frac{(-i)^2}{2} \left[\frac{\hat{H}_g(t-t_0)}{\hbar} \right] + \dots \quad (4.67)$$

Finalmente, derivando em relação a t a equação (4.67), temos

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathcal{U}}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_g (-i)^2 \left(\frac{\hat{H}_g(t-t_0)}{\hbar} \right) + \dots \quad (4.68)$$

o que leva a

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathcal{U}}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_g \left\{ \hat{1} - \frac{i\hat{H}_g(t-t_0)}{\hbar} + \frac{(-i)^2}{2} \left[\frac{\hat{H}_g(t-t_0)}{\hbar} \right] + \dots \right\}, \quad (4.69)$$

Logo,

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathcal{U}}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_g \hat{\mathcal{U}}(t, t_0). \quad (4.70)$$

Agora, se $|\psi_1(t)\rangle$ e $|\psi_2(t)\rangle$ forem soluções da equação (4.53), então

$$|\psi(t)\rangle = \lambda_1 |\psi_1(t)\rangle + \lambda_2 |\psi_2(t)\rangle, \quad (4.71)$$

também é solução. Deste modo, continua sendo válido o princípio da superposição.

4.2.2 Conservação da Probabilidade

Sendo \hat{H}_g hermitiano, mostraremos a seguir, que a norma de um estado físico permanece constante na evolução temporal. Calculemos então, a derivada temporal do seguinte produto interno:

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t) | \left[\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right] + \left[\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right] | \psi(t) \rangle. \quad (4.72)$$

Da equação (4.51), temos,

$$\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_g | \psi(t) \rangle. \quad (4.73)$$

Logo,

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)| = \frac{i}{\hbar}\hat{H}_g^\dagger\langle\psi(t) = \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}_g, \quad (4.74)$$

no qual a igualdade na equação (4.74), é válida desde que $V(x, t)$ seja real.

Substituindo as equações (4.73) e (4.74) na (4.72), obtemos,

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 0. \quad (4.75)$$

Portanto, concluímos que se um estado inicial $|\psi(t_0)\rangle$ está normalizado, então $|\psi(t)\rangle$, também estará, ou seja,

$$\langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle = 1, \quad (4.76)$$

gera como consequência,

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1. \quad (4.77)$$

Agora, deduziremos uma equação da continuidade para a densidade de probabilidade dado por:

$$\rho(x, t) = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t). \quad (4.78)$$

Agora, derivando a equação (4.78) em relação ao tempo, temos,

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) = \Psi^*(x, t)\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, t) + \Psi(x, t)\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(x, t). \quad (4.79)$$

Utilizando-se das equações (4.51) e (4.52), temos,

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) = \frac{i\hbar}{2m}[\Psi^*(x, t)\hat{D}_g^2\Psi(x, t) - \Psi(x, t)\hat{D}_g^2\Psi^*(x, t)]. \quad (4.80)$$

Da equação (4.48), é fácil notar que

$$\hat{D}_g[\phi(x)\psi(x)] = \psi(x)\hat{D}_g[\phi(x)] + \phi(x)\hat{D}_g[\psi(x)]. \quad (4.81)$$

Deste modo, das equações (4.80) e (4.81), podemos extrair a seguinte equação:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) + \frac{i\hbar}{2m}\hat{D}_g[\Psi(x, t)\hat{D}_g\Psi^*(x, t) - \Psi^*(x, t)\hat{D}_g\Psi(x, t)] = 0. \quad (4.82)$$

Se definirmos a corrente de probabilidade matematicamente por:

$$J(x, t) = \frac{i\hbar}{2m}\hat{D}_g[\Psi(x, t)\hat{D}_g\Psi^*(x, t) - \Psi^*(x, t)\hat{D}_g\Psi(x, t)], \quad (4.83)$$

das equações (4.82) e (4.83), temos

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) + \hat{D}_g J(x,t) = 0, \quad (4.84)$$

que é a equação da continuidade para a densidade de probabilidade no formalismo do operador de translação dependente da posição, e é ainda, a expressão matemática da conservação local da probabilidade.

4.2.3 Teorema de Ehrenfest Generalizado

Consideremos um determinado observável \hat{A} , dado por

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle. \quad (4.85)$$

O que queremos agora é analisar como o valor médio de \hat{A} , dado pela equação (4.85), varia com o tempo no contexto do formalismo do operador de translação dependente da posição.

Derivando então a equação (4.85), em relação ao tempo, obtemos

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = \left[\frac{d}{dt}\langle \psi(t) | \right] \hat{A} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{A} \left[\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right]. \quad (4.86)$$

Das equações (4.73) e (4.74), temos

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \left(-\langle \psi(t) | \hat{H}_g \hat{A} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{A} \hat{H}_g | \psi(t) \rangle \right) + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle. \quad (4.87)$$

Logo, o teorema de Ehrenfest se resume a

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}_g] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle. \quad (4.88)$$

Agora usando a equação (4.88), para o caso particular em que temos os operadores \hat{X} e \hat{P} , temos:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{X} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{X}, \hat{H}_g] \rangle = -\frac{i}{2m\hbar} \langle [\hat{X}, \hat{P}_g^2] \rangle. \quad (4.89)$$

Como demonstrado no apêndice A,

$$[\hat{X}, \hat{P}_g^2] = [\hat{X}, \hat{P}_g] \hat{P}_g + \hat{P}_g [\hat{P}_g, \hat{X}]. \quad (4.90)$$

Considerando ainda a equação (4.37), temos

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{X} \rangle = \frac{1}{2m} \langle \{g^{-1/2}(\hat{X}), \hat{P}_g\} \rangle. \quad (4.91)$$

Supondo que haja uma série de Taylor associada a $g^{-1/2}(\hat{X})$, então

$$g^{-1/2}(\hat{X}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \hat{X}^n, \quad (4.92)$$

logo a equação (4.91) fica,

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{X} \rangle = \frac{a_0}{m} \langle \hat{P}_g \rangle + \frac{1}{2m} \sum_{n=1}^{\infty} a_n \langle \{ \hat{X}^n, \hat{P}_g \} \rangle. \quad (4.93)$$

Para o caso em que nosso observável físico \hat{A} , trata-se de \hat{P}_g , da equação (4.88), temos,

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{P}_g \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{P}_g, \hat{H}_g] \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{P}_g, V(\hat{X})] \rangle. \quad (4.94)$$

Como mostrado no apêndice A, temos que

$$[\hat{P}_g, V(\hat{X})] = -i\hbar \hat{D}_g V(\hat{X}), \quad (4.95)$$

logo,

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{P}_g \rangle = -\langle \hat{D}_g V(\hat{X}) \rangle. \quad (4.96)$$

Agora derivando em relação ao tempo a equação (4.93) e utilizando-se da equação (4.96), obtemos

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{X} \rangle = -\frac{a_0}{m} \langle \hat{D}_g [V(\hat{X})] \rangle + \frac{1}{2m} \sum_{n=1}^{\infty} a_n \frac{d}{dt} \langle \{ \hat{X}^n, \hat{P}_g \} \rangle, \quad (4.97)$$

o que leva a

$$\frac{m}{a_0} \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{X} \rangle = -\langle \hat{D}_g [V(\hat{X})] \rangle + \frac{1}{2a_0} \sum_{n=1}^{\infty} a_n \frac{d}{dt} \langle \{ \hat{X}^n, \hat{P}_g \} \rangle. \quad (4.98)$$

Notemos que a equação (4.98), assemelha-se a segunda lei de Newton para referenciais não-inerciais, no qual o primeiro termo à direita, aparentemente corresponde as forças reais e o segundo termo, as forças não-inerciais⁹. Portanto, para os valores médios dos observáveis físicos, no contexto do formalismo do operador de translação dependente da posição, recaímos então à mecânica clássica de referenciais não-inerciais[6]. No entanto, também poderíamos interpretar estes termos extras como sendo forças reais de origem geométrica em um referencial inercial considerando o princípio da equivalência de Einstein, no qual afirma que em um referencial não inercial com a aceleração equivalente a aceleração da gravidade local num campo gravitacional.

⁹ Consulte mais sobre forças de Inércia no Cap. 13 de [26]

Deste modo, as leis físicas são as mesmas que em um referencial inercial na ausência de um campo gravitacional, as forças de inércias são indistinguíveis das forças de campo.

Consideremos um caso particular em que $a_0 = 1$, $a_1 = \gamma$, $a_2 = \beta^2$ e $a_{n \geq 3} = 0$, a equação (4.93) fica,

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{X}\rangle = \frac{\langle\hat{P}_g\rangle}{m} + \frac{\gamma}{2m}\langle\{\hat{X}, \hat{P}_g\}\rangle. \quad (4.99)$$

Considerando que,

$$\hat{P}_g = g^{-1/2}(\hat{X})\hat{P} = (1 + \gamma\hat{X} + \beta^2\hat{X}^2)\hat{P}, \quad (4.100)$$

no qual \hat{P} é o operador momento no espaço euclidiano. Deste modo, temos

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{X}\rangle = \frac{\langle\hat{P}\rangle}{m} + \frac{\gamma}{m}\langle\hat{X}\hat{P}\rangle + \beta^2\frac{\langle\hat{X}^2\hat{P}\rangle}{m} + \frac{\gamma}{2m}\langle\{\hat{X}, \hat{P}\}\rangle + \frac{\gamma^2}{2m}\langle\{\hat{X}, \hat{X}\hat{P}\}\rangle + \frac{\gamma\beta^2}{2m}\langle\{\hat{X}, \hat{X}^2\hat{P}\}\rangle. \quad (4.101)$$

Já a equação (4.96), torna-se

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{P}\rangle = -\left\langle\frac{d}{dx}[V(\hat{X})]\right\rangle - \gamma\left\langle\hat{X}\frac{d}{dx}[V(\hat{X})]\right\rangle - \beta^2\left\langle\hat{X}^2\frac{d}{dx}[V(\hat{X})]\right\rangle - \gamma\frac{d}{dt}\langle\hat{X}\hat{P}\rangle - \beta^2\frac{d}{dt}\langle\hat{X}^2\hat{P}\rangle. \quad (4.102)$$

no qual utilizamos também a equação (4.100). Desta forma, notemos que quando $\gamma = 0$ e $\beta = 0$, as equações (4.101) e (4.102), recaem em semelhança à equação do teorema de Ehrenfest tradicional.

Derivando agora, a equação (4.101) em relação ao tempo, e utilizando-se da equação (4.102), obtemos

$$\begin{aligned} m\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{X}\rangle &= -\left\langle\frac{d}{dx}[V(\hat{X})]\right\rangle - \gamma\left\langle\hat{X}\frac{d}{dx}[V(\hat{X})]\right\rangle - \beta^2\left\langle\hat{X}^2\frac{d}{dx}[V(\hat{X})]\right\rangle \\ &+ \frac{\gamma}{2}\frac{d}{dt}\langle\{\hat{X}, \hat{P}\}\rangle + \frac{\gamma^2}{2}\frac{d}{dt}\langle\{\hat{X}, \hat{X}\hat{P}\}\rangle + \frac{\gamma\beta^2}{2}\frac{d}{dt}\langle\{\hat{X}, \hat{X}^2\hat{P}\}\rangle, \end{aligned} \quad (4.103)$$

cuja forma, para $\gamma = 0$ e $\beta = 0$, assemelha-se em muito com a segunda lei de Newton.

4.2.3.1 Mecânica Clássica em um Espaço Deformado

Agora, iremos obter as equações de movimento de uma partícula clássica em um espaço unidimensional deformado com a seguinte métrica:

$$ds^2 = \frac{1}{(1 + \gamma x + \beta^2 x^2)^2} dx^2. \quad (4.104)$$

A lagrangiana¹⁰ do sistema é dado por

$$\mathcal{L} = T - V = \frac{1}{2}m\dot{s}^2 - V(x), \quad (4.105)$$

¹⁰ Consulte mais sobre a dinâmica lagrangiana no Cap. 1 de [27]

no qual a velocidade v é dado por

$$v \equiv \dot{s} = \frac{\dot{x}}{1 + \gamma x + \beta^2 x^2}. \quad (4.106)$$

Das equações (4.105) e (4.106), obtemos

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \frac{m\dot{x}^2}{(1 + \gamma x + \beta^2 x^2)^2} - V(x). \quad (4.107)$$

As equações de Lagrange mantém a sua forma estrutural mesmo para espaços deformados[28], logo,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \right) = 0. \quad (4.108)$$

Deste modo, substituindo a equação (4.107) na equação (4.108), chegamos a equação de movimento para a partícula no formalismo lagrangiano,

$$\frac{m\ddot{x}}{(1 + \gamma x + \beta^2 x^2)^2} - \frac{m\dot{x}^2(\gamma + 2\beta x)}{(1 + \gamma x + \beta^2 x^2)^3} = -\frac{dV}{dx}. \quad (4.109)$$

O momento da partícula é definido por,

$$p \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}}, \quad (4.110)$$

o que nos leva a

$$p = \frac{m\dot{x}}{(1 + \gamma x + \beta^2 x^2)^2}. \quad (4.111)$$

Via a transformada de Legendre da lagrangiana, a hamiltoniana¹¹ do sistema é dado por

$$H(x, p) \equiv p\dot{x} - \mathcal{L}(x, \dot{x}), \quad (4.112)$$

que ao usarmos a equação (4.111), concluimos que

$$H(x, p) = \frac{(1 + \gamma x + \beta^2 x^2)^2}{2m} p^2 + V(x). \quad (4.113)$$

Diferenciando então, a equação (4.112), obtemos

$$dH = p d\dot{x} + \dot{x} dp - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} dx - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} d\dot{x}, \quad (4.114)$$

que ao se utilizar da equação (4.108) e da equação (4.110), chegamos a

$$dH = \dot{x} dp - p dx. \quad (4.115)$$

¹¹ Consulte mais sobre a dinâmica Hamiltoniana em [27].

Por outro lado, temos que

$$dH = \frac{\partial H}{\partial x} dx + \frac{\partial H}{\partial p} dp, \quad (4.116)$$

que se compararmos com a equação (4.115), concluimos que

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad (4.117)$$

e

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}. \quad (4.118)$$

que são as equações canônicas de Hamilton[6].

Das equações (4.113), (4.117) e da equação (4.118), obtemos as equações de movimento da partícula no formalismo hamiltoniano:

$$\dot{x} = \frac{(1 + \gamma x + \beta^2 x^2)^2}{2} p, \quad (4.119)$$

e

$$\dot{p} = -\frac{(1 + \gamma x + \beta^2 x^2)\gamma p^2}{m} - \frac{d}{dx}V(x). \quad (4.120)$$

As equações (4.119) e (4.120), são equivalentes às obtidas no formalismo de Lagrange e podem ser reescritas respectivamente como:

$$\dot{x} = \frac{p}{m} + \frac{\gamma}{m}xp + \frac{\beta^2}{m}x^2p + \frac{\gamma}{2m}(xp + px) + \frac{\gamma^2}{2m}(xpx + pxp) + \frac{\gamma\beta^2}{2m}(xx^2p + x^2px), \quad (4.121)$$

e

$$\dot{p} = -\frac{d}{dx}V(x) - \gamma x \frac{d}{dx}V(x) - \beta^2 x^2 \frac{d}{dx}V(x) - \gamma \frac{d}{dt}(xp) - \beta^2 \frac{d}{dt}(x^2p). \quad (4.122)$$

Notemos que as equações (4.121) e (4.122), são as equivalentes clássicas das equações (4.101) e (4.102).

Agora se derivarmos em relação ao tempo a equação (4.121) e utilizarmos a equação (4.122), obtemos,

$$\begin{aligned} m\ddot{x} = & -\frac{d}{dx}V(x) - \gamma x \frac{d}{dx}V(x) - \beta^2 x^2 \frac{d}{dx}V(x) + \frac{\gamma}{2} \frac{d}{dt}(xp + px) \\ & + \frac{\gamma^2}{2} \frac{d}{dt}(xpx + pxp) + \frac{\gamma\beta^2}{2} \frac{d}{dt}(xx^2p + x^2px), \end{aligned} \quad (4.123)$$

que é a equivalente clássica da equação (4.103). Portanto, essa é a expressão para a segunda lei de Newton para o espaço deformado com a métrica definida na equação (4.104)[6]. Como

escrito anteriormente, tanto a equação (4.103) quanto a equação (4.123), aparenta ser a segunda lei de Newton para referenciais não-inerciais; os termos extras existentes se devem pela origem da métrica não-euclidiana do espaço.

Notemos que é fato que não identificamos nenhum referencial acelerado em relação a um referencial inercial, no entanto, se considerarmos o princípio da equivalência de Einstein, os termos extras da equação (4.104) e da equação (4.123), podem ser interpretados como forças de origem puramente geométrica, no qual a presença se justifica com a métrica não-euclidiana do espaço. Notamos que estes termos, dependem de γ e β , que por sua vez, dependem diretamente do tensor métrico do espaço; este tensor, é alterado pela presença de campos gravitacionais. Deste modo, não é um absurdo conjecturar que estas forças correspondam a forças gravitacionais. No entanto, como a teoria ainda é incompleta, ainda falta estabelecer estas conexões, e por exemplo, mostrar qual seria a causa destes possíveis campos gravitacionais.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

No presente trabalho, apresentamos a representação de Dirac da mecânica quântica tradicional[1, 4, 8]. Foi mostrado que para este formalismo, um estado quântico pode ser representado matematicamente por um ket de estado, um vetor de estado que pertence a um espaço vetorial complexo e abstrato. Definimos este espaço, o espaço dos bras, e também suas propriedades fundamentais; discutimos as funções de onda; vimos que os observáveis físicos agora poderiam ser representados por operadores hermitianos e que, os possíveis resultados das medidas eram dados pelos autovalores correspondentes a estes operadores.

Em resumo, numa primeira parte deste trabalho, apresentamos o formalismo matemático de Dirac para espectros discretos, no qual apresentamos os primeiros conceitos, primeiras definições e algumas propriedades fundamentais. Em seguida, generalizamos todo o formalismo de Dirac para espectros contínuos, no qual vimos que o momento pode ser interpretado como gerador de translações.

No Capítulo 4, apresentamos o formalismo do operador de translação dependente da posição, para o caso unidimensional, no qual consiste em uma teoria desenvolvida a partir de primeiros princípios, cujo objetivo é verificar quais são os efeitos sobre a teoria quântica com a quebra de simetria de translação, que neste caso é causado por espaços curvos, ou seja, há uma mudança da métrica do espaço. Inicialmente definiu-se que o espaço das posições seria o espaço de Riemann unidimensional, e ao associarmos por consequência, um peso ao espaço de Hilbert, as relações de completeza e ortonormalização dos autoestados do operador \hat{X} foram modificadas[6]. Agora, o operador de translação espacial não apresentava mais um caráter aditivo, no qual resultou em uma nova relação de comutação entre os operadores de posição e de momento. Além disso, notamos que como consequência da mudança da métrica do espaço, até mesmo a equação de Schrödinger foi modificada.

Exploramos também algumas consequências físicas do formalismo PDTTO. Vimos que o determinismo na evolução temporal continua ainda valendo, que o princípio da superposição e a conservação da probabilidade local e global também continuam sendo válidos. Além disso, generalizamos também o teorema de Ehrenfest, no qual mostramos que para os valores médios dos observáveis físicos, o formalismo PDTTO, se reduz aparentemente à mecânica clássica em um referencial não-inercial. Além disso, vimos que pelo princípio da equivalência de Einstein, poderíamos interpretar os termos que surgiu na segunda lei de Newton para um espaço deformado, como sendo forças de origem puramente geométricas.

Como perspectiva para trabalhos futuros, pretendemos estudar o formalismo bi-dimensional e tridimensional do operador de translação dependente da posição. Além disso, pretendemos estabelecer conexões entre os coeficientes γ e β com os fatores de escala, ao expandir o formalismo PDT0 em coordenadas generalizadas.

REFERÊNCIAS

- [1] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloë, *Quantum Mechanics*, Vol.1 (Hermann and John Wiley and Sons, Paris, 1977).
- [2] R. P. Feynman, R. B. Leighton e M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics* Vol. III: Quantum Mechanics (Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1965).
- [3] Richard P Feynman, Robert B Leighton, and Matthew Sands. *Lições de Física–Vol. 1*. Tradução de Adriana VR da Silva e Kaline R. Coutinho. Porto Alegre: Bookman, 2008.
- [4] J. J. Sakurai and Jim Napolitano. *Mecânica quântica moderna*. 2. ed. Tradução técnica: Sílvio Renato Dahmen. Porto Alegre: Bookman, 2013.
- [5] W. Heisenberg , *The Physical Principles of the Quantum Theory* (Dover Publications, New York, 1949).
- [6] J. P. M. Braga. *Mecânica quântica não-aditiva*. 2015. 64 f. tese (doutorado em física). Universidade Federal do Ceará, Ceará, 2015.
- [7] P. A. M. Dirac. *The Principles of Quantum Mechanics*. 1947. 3rd ed. (Clarendon, Oxford).
- [8] D. J. Griffiths. *Mecânica quântica*. 2. ed., São Paulo:Pearson, 2015.
- [9] D. F. Styer, M. S. Balkin, K. M. Becker, M. R. Burns, C. E. Dudley, S. T. Forth, J. S. Gaumer, M. A. Kramer, D. C. Oertel, L. H. Park, M. T. Rinkoski, C. T. Smith and T. D. Wotherspoon, *Nine Formulations of Quantum Mechanics*, Am. J. Phys. 70 (3), March 2002.
- [10] Oliveira, A.R. *Princípio da incerteza estendido a partir de primeiros princípios*. 2021. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) - Estudante, Redenção, 2021.
- [11] R. N. Costa Filho, M. P. Almeida, G. A. Farias e J. S. Andrade Jr., *Displacement Operator for Quantum Systems with Position-dependent Mass*, Phys. Rev. A 84, 050102-1 - 050102-4 (2011).
- [12] R. Eisberg and R. Resnick, *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles*, 2 nd Ed. (John Wiley, 1985).
- [13] B. Friedrich and H. Dudley, "Stern and Gerlach: How a bad cigar helped reorient atomic physics." *Physics Today* 56 12, 53 (2003).

- [14] French, A. P.; Taylor, Edwin. F. *An Introduction to Quantum Physics*. [S. l.: s. n.], 1978.
- [15] Disponível em: <https://slideplayer.com.br/slide/12439559/> Acessado em: 07/01/2022.
- [16] Mulders, P. J. *Advanced Quantum Mechanics*. [S. l.: s. n.], 2012.
- [17] Shankar, R. *Principles of Quantum Mechanics*. 2nd. ed. [S. l.: s. n.], 1994.
- [18] Arfken, G. B.; WEBER, H. J. *Física Matemática: Métodos Matemáticos para Engenharia e Física*. [S. l.: s. n.], 2007.
- [19] Gaelzer, R. *Física-Matemática*. [S. l.: s. n.], 2019.
- [20] Dirac, P. A. M. *Quantum Mechanics*, 4th ed. London: Oxford University Press, 1958.
- [21] Liboff, R. L. *Introductory Quantum Mechanics*. [S. l.: s. n.], 1980.
- [22] Goldsteins, H. C. Poole, and J. Safko. *Classical Mechanics*, 3rd, Reading, MA: Addison-Wesley, 2002.
- [23] Azambuja, Haroldo Froes de. *A Função Delta: Propriedades e Aplicações*. [S. l.: s. n.], 1964.
- [24] Nussenzveig, H. Moysés. *Curso de Física Básica 4: Ótica Relatividade Física Quântica*.
S.l. : s.n.
 , 1998.
- [25] Lorentz, H. A; Einstein, A.; Minkowski, H. *O Princípio da Relatividade*. [S. l.]: 3ed, 1983.
- [26] Nussenzveig, H. M. *Curso de Física Básica 1: Mecânica*. 5. ed. [S. l.: s. n.], 2013.
- [27] Lemos, N. A. *Mecânica Analítica*. [S. l.: s. n.], 2007.
- [28] Sokolnikoff, I. S. *Tensor Analysis, Theory and Applications to Geometry and Mechanics of Continua*. [S. l.: s. n.], 1964.

APÊNDICE A – DEMONSTRAÇÕES MATEMÁTICAS

Por uma questão de complementação para este TCC, este apêndice contém algumas demonstrações de propriedades importantes.

I) Demonstração da unitariedade do operador de translação.

$$\hat{\mathcal{S}}^\dagger(dx_i)\hat{\mathcal{S}}(dx_i) = (\hat{1} + i\hat{K}^\dagger \cdot dx_i) \cdot (\hat{1} - i\hat{K} \cdot dx_i), \quad (\text{A.1})$$

o que leva a

$$\hat{\mathcal{S}}^\dagger(dx_i)\hat{\mathcal{S}}(dx_i) = \hat{1} - i(\hat{K} - \hat{K}^\dagger) \cdot dx_i + 0[(dx_i)^2] \approx \hat{1}, \quad (\text{A.2})$$

no qual os termos em segunda ordem de dx_i foram ignorados para o caso de uma translação infinitesimal.

II) Demonstração da aditividade do operador de translação.

$$\hat{\mathcal{S}}(dx_j)\hat{\mathcal{S}}(dx_i) = (\hat{1} - i\hat{K} \cdot dx_j) \cdot (\hat{1} - i\hat{K} \cdot dx_i), \quad (\text{A.3})$$

o que leva a

$$\hat{\mathcal{S}}(dx_j)\hat{\mathcal{S}}(dx_i) \approx \hat{1} - i\hat{K}(dx_i + dx_j) = \hat{\mathcal{S}}(dx_i + dx_j). \quad (\text{A.4})$$

III) Queremos demonstrar a seguinte fórmula:

$$[\hat{A}, \hat{B}^n] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{B}^n + \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}^{n-1}].$$

Demonstração:

$$[\hat{A}, \hat{B}^n] = \hat{A}\hat{B}^n - \hat{B}^n\hat{A} = \hat{A}\hat{B}\hat{B}^{n-1} - \hat{B}\hat{B}^{n-1}\hat{A}. \quad (\text{A.5})$$

o que leva a

$$[\hat{A}, \hat{B}^n] = \hat{A}\hat{B}\hat{B}^{n-1} - \hat{B}\hat{A}\hat{B}^{n-1} + \hat{B}\hat{A}\hat{B}^{n-1} - \hat{B}\hat{B}^{n-1}\hat{A}. \quad (\text{A.6})$$

Portanto,

$$[\hat{A}, \hat{B}^n] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{B}^n + \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}^{n-1}]. \quad (\text{A.7})$$

IV) Queremos demonstrar a seguinte fórmula:

$$[\hat{P}_g, \hat{X}^n] = -i\hbar g^{-1/2}(\hat{X})\hat{X}^{n-1}.$$

Demonstração:

Utilizando-se das Eq. (A.7) e (4.37) seguidas vezes temos

$$[\hat{P}_g, \hat{X}^n] = [\hat{P}_g, \hat{X}] \hat{X}^{n-1} + \hat{X} [\hat{P}_g, \hat{X}^{n-1}], \quad (\text{A.8})$$

logo,

$$\begin{aligned} [\hat{P}_g, \hat{X}^n] &= -i\hbar g^{-1/2}(\hat{X}) \hat{X}^{n-1} + \hat{X} ([\hat{P}_g, \hat{X}^{n-2}] + \hat{X} [\hat{P}_g, \hat{X}^{n-2}]) \\ &= -2i\hbar g^{-1/2}(\hat{X}) \hat{X}^{n-1} + \hat{X}^2 ([\hat{P}_g, \hat{X}^{n-3}] + \hat{X} [\hat{P}_g, \hat{X}^{n-3}]) \\ &= -3i\hbar g^{-1/2}(\hat{X}) \hat{X}^{n-1} + \hat{X}^3 ([\hat{P}_g, \hat{X}^{n-4}] + \hat{X} [\hat{P}_g, \hat{X}^{n-4}]) \\ &\quad \vdots \end{aligned}$$

$$[\hat{P}_g, \hat{X}^n] = -ni\hbar g^{-1/2}(\hat{X}) \hat{X}^{n-1}. \quad (\text{A.9})$$

V) Queremos demonstrar a seguinte fórmula:

$$[\hat{P}_g, f(\hat{X})] = -i\hbar \hat{D}_g f(\hat{X}).$$

Demonstração:

Supondo que a função $f(z)$ possua uma série de Taylor, logo temos,

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n z^n. \quad (\text{A.10})$$

Deste modo, a correspondente função para um operador \hat{A} é definido como[1]

$$f(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \hat{A}^n. \quad (\text{A.11})$$

Portanto, ficamos com a seguinte relação de comutação:

$$[\hat{P}_g, f(\hat{X})] = \left[\hat{P}_g, \sum_{n=0}^{\infty} f_n \hat{X}^n \right] = \sum_{n=0}^{\infty} f_n [\hat{P}_g, \hat{X}^n]. \quad (\text{A.12})$$

Substituindo então, a Eq. (A.9) na Eq. (A.12), temos,

$$[\hat{P}_g, f(\hat{X})] = \sum_{n=0}^{\infty} f_n [-ni\hbar g^{-1/2}(\hat{X}) \hat{X}^{n-1}] = -i\hbar g^{-1/2}(\hat{X}) \sum_{n=0}^{\infty} f_n n \hat{X}^{n-1}. \quad (\text{A.13})$$

Portanto,

$$[\hat{P}_g, f(\hat{X})] = -i\hbar \hat{D}_g f(\hat{X}). \quad (\text{A.14})$$