

Uma Breve Introdução à Matemática da Mecânica Quântica

Publicações Matemáticas

**Uma Breve Introdução à Matemática
da Mecânica Quântica**

Artur O. Lopes
UFRGS



31^o Colóquio Brasileiro de Matemática

Copyright © 2017 by Artur O. Lopes
Direitos reservados, 2017 pela Associação Instituto
Nacional de Matemática Pura e Aplicada - IMPA
Estrada Dona Castorina, 110
22460-320 Rio de Janeiro, RJ

Impresso no Brasil / Printed in Brazil

Capa: Noni Geiger / Sérgio R. Vaz

31º Colóquio Brasileiro de Matemática

- Álgebra e Geometria no Cálculo de Estrutura Molecular - C. Lavor, N. Maculan, M. Souza e R. Alves
- Continuity of the Lyapunov Exponents of Linear Cocycles - Pedro Duarte e Silvius Klein
- Estimativas de Área, Raio e Curvatura para H -superfícies em Variedades Riemannianas de Dimensão Três - William H. Meeks III e Álvaro K. Ramos
- Introdução aos Escoamentos Compressíveis - José da Rocha Miranda Pontes, Norberto Mangiavacchi e Gustavo Rabello dos Anjos
- Introdução Matemática à Dinâmica de Fluidos Geofísicos - Breno Raphaldini, Carlos F.M. Raupp e Pedro Leite da Silva Dias
- Limit Cycles, Abelian Integral and Hilbert's Sixteenth Problem - Marco Uribe e Hossein Movasati
- Regularization by Noise in Ordinary and Partial Differential Equations - Christian Olivera
- Topological Methods in the Quest for Periodic Orbits - Joa Weber
- **Uma Breve Introdução à Matemática da Mecânica Quântica - Artur O. Lopes**

Distribuição:

IMPA
Estrada Dona Castorina, 110
22460-320 Rio de Janeiro, RJ
e-mail: ddic@impa.br
<http://www.impa.br>

ISBN: 978-85-244-0440-5

Prefácio

Este livro descreve em precisos termos matemáticos os conceitos e as propriedades básicas da Mecânica Quântica. Para o entendimento do texto não será necessário nenhum conhecimento prévio de Física.

A Mecânica Quântica é a teoria que descreve as leis físicas que regem as partículas de massa muito pequena. O seu entendimento foi sem dúvida um dos grandes feitos científicos do século XX.

Nosso objetivo ao escrever este texto foi permitir que os estudantes (e colegas) dos nossos cursos de Matemática possam entender e apreciar a beleza desta teoria. Foi planejado para ser uma primeira leitura sobre este tópico. O texto foi escrito por e para pessoas que são principiantes neste tópico.

Nossa intenção foi produzir um texto em português que descreva a Mecânica Quântica de forma que seja matematicamente inteligível, e, ao mesmo tempo, que não se prenda a detalhes de formalização excessiva. Numa primeira leitura, este excesso a que me refiro, pode comprometer o entendimento das idéias fundamentais. Tentamos manter a redação dentro de um equilíbrio entre estes dois extremos. A teoria é ilustrada com muitos exemplos.

A Mecânica Quântica é daquelas teorias em que se precisa compreender certa quantidade razoável de resultados para que o "todo" faça sentido. Assim, nossa sugestão é que o leitor tente entender a cada passo o que vai sendo exposto, mas sem se prender demais a aspectos que, eventualmente, não ficaram de todo claro. Muitas vezes, um pouco mais adiante no texto, aquilo que não foi de todo compreendido se esclarece quando olhado de um panorama mais amplo.

Não iremos discutir no texto os aspectos mais diretamente ligados a interpretação física dos fenômenos discutidos. Existem na teoria vários paradoxos e até mesmo conflitos de interpretação entre os eminentes físicos que trabalham nesta área.

O presente livro, em termos aproximados, é um resumo da primeira parte do texto disponível on line

<http://mat.ufrgs.br/~alopes/hom/livroquantum.pdf>

Ao começo do texto do Colóquio apresentamos uma seção com alguns pré-requisitos matemáticos.

Acreditamos que com o conhecimento básico adquirido ao longo do texto o leitor poderá no futuro ler e entender alguns tópicos mais

avançados deste assunto. Os mencionados tópicos mais avançados da Mecânica Quântica tem interseção com distintas áreas da Matemática entre elas Análise Funcional, Análise Harmônica, Equações Diferenciais Parciais, Probabilidade, Geometria Diferencial, Topologia Algébrica, Sistemas Dinâmicos, Teoria dos Números, Teoria da Informação, Álgebra, enfim quase todas as áreas da Matemática. O livro traz um extensa bibliografia remetendo a distintos tópicos de pesquisa, entre estes os relativos a Teoria da Informação Quântica e o estudo de redes de spins quânticos; tópicos estes que serão certamente úteis no futuro em função da "esperada" entrada em funcionamento do computador quântico (que ainda não é efetivamente operacional).

Uma apresentação pelo Prof. A. Baraviera de parte do texto - em vários capítulos - pode ser encontrada no Youtube.

Desejo agradecer a vários colegas com quem tive o prazer de discutir questões relativas ao presente texto: Ph. Thieullen, A. Baraviera, S. Prado, M. Terra Cunha, M. Disconzi, M. Sebastiani, C. F. Lardizabal, J. Mengue, J. Mohr, R. Souza, R. Bissacot, L. Ciolletti, R. Exel, Agradeço sobremaneira aos estudantes que assistiram a tres edições do curso de Mecânica Quântica que ministrei no Inst. Mat. da UFRGS: Carlos Scarinci, Gilles Castro, Vilarbo Junior, Alvaro Kruger Ramos, Douglas dos Santos, Eduardo Fischer, Fagner Rodrigues, Mirian Telichevesky, Otavio Menezes, Patricia Klaser, Rangel Baldasso, Thomas Bartlett, Felipe Guarnieri, Jader Brasil, Josué Knorst, Luísa Borsato e Newton Loebens. Eles participaram da elaboração de diversas partes do presente texto. As eventuais incorreções, naturalmente, devem ser atribuídas ao autor. Alguns textos que recomendamos como leitura básica suplementar e que, de alguma forma, influenciaram a redação do presente livro são:

1. S. Gustafson and I. Sigal, Mathematical concepts of Quantum Mechanics, Springer Verlag
2. K. Hannabuss, An introduction to Quantum Theory, Oxford Press.

Artur O. Lopes
UFRGS

Porto Alegre, 7 de maio de 2017.

Índice

1	Alguns pré-requisitos	1
2	Estados e a equação de Schrödinger	33
3	O Comutador na Mecânica Quântica	64
4	Observáveis, valor esperado e o operador momento	70
5	Transformada de Fourier	92
6	O Momento via Transformada de Fourier	99
7	Exemplos	109
8	Princípio da Incerteza e o Pacote de Onda Gaussiano	125
9	Operador densidade	137
10	Operadores Trace Class	150
11	Mecânica Estatística Quântica	156
12	Uma generalização da Teoria de Hamilton-Jacobi	163
13	Distribuições e Transformada de Fourier	178
	Bibliografia	187

Capítulo 1

Alguns pré-requisitos

Vamos inicialmente considerar alguns resultados e propriedades básicas dos espaços vetoriais de dimensão infinita (sobre o corpo dos números complexos) com produto interno. O caso em que o espaço vetorial tem dimensão finita é tratado com bastante detalhe na seção 21 de [178].

Referimos o leitor a [244] ou [219] para um aprofundamento dos diversos resultados e conceitos que vez por outra serão usados nesta seção.

Um elemento genérico em \mathbb{C} é expresso como $z = a + bi$, onde, $i^2 = -1$ e $a, b \in \mathbb{R}$.

Se $u = a + bi$ e $v = c + di$ então

$$uv = (a + bi)(c + di) = ac + adi + bci + bdi^2 = (ac - bd) + (ad + bc)i.$$

Todo número complexo $a + bi$ se escreve como

$$a + bi = \alpha e^{\beta i} = \alpha (\cos(\beta) + i \sin(\beta)),$$

onde $\alpha \geq 0$ e $0 \leq \beta < 2\pi$ são reais. Se chama $\alpha = |z|$ de norma (ou, amplitude) de $a + bi$ e β de fase de $a + bi$. Acima $\beta = \arctan \frac{b}{a}$ e $\alpha = \sqrt{a^2 + b^2}$.

Note que, dado $\beta \in [0, 2\pi)$, então $e^{\beta i} + e^{(\beta + \pi)i} = 0$.

$\bar{z} = (a - bi)$ denota o complexo conjugado de $z = a + bi$.

Note que se $\bar{z} = z$, então $a - bi = a + bi$, logo, $b = 0$. Assim, $z \in \mathbb{R}$.

Ainda, vale que $\overline{\bar{z}} = z$ e $z\bar{z} = a^2 + b^2 = |z|^2$.

Observe que $\overline{z_1 + z_2} = \bar{z}_1 + \bar{z}_2$ e $\overline{z_1 z_2} = \bar{z}_1 \bar{z}_2$.

Vamos considerar aqui prioritariamente espaços vetoriais E sobre o corpo dos escalares complexos (ver seção 21 em [178] para definição exata). Assim, se $v_1, v_2 \in E$, e $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}$, então está bem definido $\alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 \in E$.

Se E é um espaço vetorial sobre o corpo dos complexos \mathbb{C} , então um **produto interno** \langle, \rangle sobre E é uma função de $E \times E \rightarrow \mathbb{C}$, tal que, para qualquer $u, v, v' \in E$, e λ em \mathbb{C} , vale o seguinte:

- 1) $\langle u, v \rangle = \overline{\langle v, u \rangle}$;
- 2) $\langle u + u', v \rangle = \langle u, v \rangle + \langle u', v \rangle$;
- 3) $\langle \lambda u, v \rangle = \lambda \langle u, v \rangle$;
- 4) $\langle u, u \rangle \geq 0$, se $u \neq 0$.

Para mais detalhes recomendamos o leitor para a seção 21 em [178].

Fizemos a escolha $\langle \lambda u, v \rangle = \lambda \langle u, v \rangle$ e não $\langle u, \lambda v \rangle = \lambda \langle u, v \rangle$, o que seria também possível assumir como definição.

Note que segue do que foi dito acima que $\langle u, \lambda v \rangle = \overline{\lambda} \langle u, v \rangle$. Ainda, $\langle u, v + v' \rangle = \langle u, v \rangle + \langle u, v' \rangle$.

Ainda, para todo $v \in E$ vale que $\langle v, v \rangle$ é real e não negativo. Além disso, $\langle v, v \rangle = 0$, se e só se, $v = 0$.

Dado um produto interno \langle, \rangle sobre um espaço vetorial E podemos definir a norma associada através de

$$|v| = \sqrt{\langle v, v \rangle}.$$

Uma norma $|\cdot|$ sobre E possui as propriedades: a) $|0| = 0$, b) $|v| \geq 0$, c) $|v| > 0$ se $v \neq 0$, d) $|u + v| \leq |u| + |v|$, para qualquer u, v , e finalmente, e) $|\lambda v| = |\lambda| |v|$, para qualquer escalar $\lambda \in \mathbb{C}$ e qualquer $v \in E$.

A propriedade $|u + v| \leq |u| + |v|$ é denominada de desigualdade triangular.

Assim, dado um espaço vetorial E com produto interno existe uma maneira natural de se obter uma norma em E .

Uma propriedade importante é a desigualdade de Cauchy-Schwarz (ver prova em [178] ou [179]) que diz que dados $v_1, v_2 \in E$, então

$$| \langle v_1, v_2 \rangle | \leq |v_1| |v_2|,$$

Dada uma sequência de vetores $v_n \in \mathcal{H}$, diremos que a sequência v_n converge ao vetor $w \in \mathcal{H}$, se para qualquer $\epsilon > 0$, existe um $N > 0$, tal que para todo $n > N$, vale $|w - v_n| < \epsilon$. Este fato será denotado por

$$\lim_{n \rightarrow \infty} v_n = w.$$

A expressão v_n converge a w quando $n \rightarrow \infty$ também é bastante usada.

Dada uma sequência de vetores $v_n \in \mathcal{H}$, diremos que a sequência v_n é de Cauchy se para qualquer $\epsilon > 0$, existe um $N > 0$, tal que para todo $m, n > N$, vale $|v_m - v_n| < \epsilon$.

É fácil ver que toda sequência convergente é de Cauchy (isto segue da desigualdade triangular). Para espaços vetoriais de dimensão finita a recíproca é verdadeira. Para espaços de dimensão infinita nem sempre vale a recíproca.

Um espaço normado é dito completo quando toda sequência de Cauchy converge.

Dizemos que a série $\sum_{n=0}^{\infty} x_n$, onde x_n está num espaço normado com norma $|\cdot|$, converge a x se $\lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^k x_n = x$. Denotamos $\sum_{n=0}^{\infty} x_n = x$. Se o espaço normado é completo vale a seguinte propriedade fundamental: se $\sum_{n=0}^{\infty} |x_n| < \infty$, então existe x tal que $\sum_{n=0}^{\infty} x_n = x$.

Definição 1.1. Um espaço vetorial \mathcal{H} sobre o corpo dos complexos com produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$, e a correspondente norma

$$|v| = \sqrt{\langle v, v \rangle},$$

para cada vetor em \mathcal{H} , será chamado de espaço de Hilbert se ele for completo para tal norma (ver [157] [57] [281] para mais detalhes).

O exemplo mais simples de espaço de Hilbert é o conjunto dos números complexos \mathbb{C} com o produto interno $\langle u, v \rangle = u \bar{v}$, onde \bar{z} denota o complexo conjugado de z . Mais exatamente, se $u = a + bi$ e

$v = c + di$, então, $u\bar{v} = (a + bi)(c - di)$. Neste caso, $|z| = \sqrt{x^2 + y^2}$, se $z = x + yi$.

$E = \mathbb{C}^n = \underbrace{\mathbb{C} \times \mathbb{C} \times \dots \times \mathbb{C}}_{n \text{ vezes}}$ é um espaço vetorial sobre o corpo dos complexos \mathbb{C} .

Dados $u = (u_1, u_2, \dots, u_n)$ e $z = (z_1, z_2, \dots, z_n)$ em \mathbb{C}^n , o produto interno de u e z é, por definição,

$$\langle u, z \rangle = u_1 \bar{z}_1 + u_2 \bar{z}_2 + \dots + u_n \bar{z}_n.$$

Note que para $\lambda, u, v \in \mathbb{C}$, vale

$$\langle u, \lambda v \rangle = \bar{\lambda} \langle u, v \rangle$$

e

$$\langle \lambda u, v \rangle = \lambda \langle u, v \rangle.$$

O espaço vetorial complexo E acima é de Hilbert e tem dimensão finita. Os espaços vetoriais de Hilbert que vamos prioritariamente considerar no texto tem dimensão infinita.

Algumas vezes usamos também a notação $\langle x|y \rangle$ em vez da expressão $\langle x, y \rangle$.

$$\text{Note que } \langle u, v \rangle = \langle u|v \rangle = \overline{\langle v|u \rangle} = \overline{\langle v, u \rangle}.$$

As vezes se diz que $\langle u|v \rangle$ é o "braket" do vetor u com o vetor v .

Definição 1.2. Dizemos que um conjunto $\psi_n, n \in \mathbb{N}$ é um conjunto enumerável ortonormal completo em \mathcal{H} se,

- 1) $|\psi_n| = 1, \forall n \in \mathbb{N}$,
- 2) $\langle \psi_n, \psi_m \rangle = 0, \forall m \neq n$,
- 3) para qualquer ψ existe uma escolha $\alpha_n \in \mathbb{C}, n \in \mathbb{N}$, tal que

$$\psi = \lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^k \alpha_n \psi_n.$$

Acima queremos dizer que se $v_k = \sum_{n=0}^k \alpha_n \psi_n \in \mathcal{H}$, então esta sequência v_k converge ao vetor ψ quando $k \rightarrow \infty$.

Alguns textos requerem que na Definição 1.1 se exija que o espaço de Hilbert possua um conjunto enumerável denso (chamado de espaço de Hilbert separável). Todos os espaços que vamos considerar aqui, entre eles o espaço das funções de quadrado integrável em \mathbb{R}^n , (ver definição a seguir) satisfazem tal propriedade.

O limite acima será descrito pela expressão formal

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \psi_n.$$

É fácil ver que neste caso vale $\psi = \sum_n \langle \psi_n | \psi \rangle \psi_n$, ou seja, temos que $\alpha_n = \langle \psi_n | \psi \rangle$. Além disto,

$$|\psi| = \sqrt{\sum_n |\alpha_n|^2} = \sqrt{\sum_n |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2}.$$

É importante não confundir o conceito de conjunto ortonormal completo com o conceito de base de um espaço vetorial (que considera apenas somas finita).

Os exemplos de espaços de Hilbert que consideraremos usualmente são

1) $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^n)(dx)$ é o conjunto dos $\phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ tais que,

$$\int \int \dots \int |\phi|^2(x) dx = \int |\phi(x_1, x_2, \dots, x_n)|^2 dx_1 dx_2 \dots dx_n < \infty,$$

onde $dx = dx_1 dx_2 \dots dx_n$ é a medida de Lebesgue usual. Uma função ϕ do tipo acima é chamada de função de quadrado integrável.

Para $\phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$, e $\psi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$, tais que, $\int |\phi|^2(x) dx < \infty$, $\int |\psi|^2(x) dx < \infty$, definimos o produto interno

$$\langle \phi, \psi \rangle = \int \phi(x) \overline{\psi(x)} dx.$$

Neste caso, $|\phi| = \sqrt{\int |\phi(x)|^2 dx} = \sqrt{\langle \phi, \phi \rangle}$ define uma norma que o torna um espaço de Hilbert. Note que uma função ψ neste

espaço esta definida a menos de um conjunto de medida de Lebesgue zero [96]. Dizer que duas funções ϕ, ψ estão ϵ próximas significa que

$$\sqrt{\int |\phi(x) - \psi(x)|^2 dx} < \epsilon.$$

Referimos o leitor a [21] para maiores detalhes sobre o assunto. Observamos que não necessitaremos no texto de um entendimento maior sobre a medida de Lebesgue em \mathbb{R}^n ; apenas saber que a classe das funções integráveis à Lebesgue é maior do que aquelas integráveis no sentido usual de Riemann e ainda que a norma $|\phi| = \sqrt{\langle \phi, \phi \rangle}$ torna as funções de quadrado integrável (considerando a integral de Lebesgue) um espaço normado completo.

Este espaço vetorial tem dimensão infinita. Para maiores detalhes sobre o espaço \mathcal{L}^2 referimos o leitor a [21].

2) Seja A um retângulo finito em \mathbb{R}^n , ou seja,

$$A = [c_1, d_1] \times [c_2, d_2] \times \dots \times [c_n, d_n].$$

Então consideraremos o espaço vetorial complexo $\mathcal{H} = \mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(A)(dx)$, onde dx é a medida de Lebesgue em A , e para $\phi : A \rightarrow \mathbb{C}$, e $\psi : A \rightarrow \mathbb{C}$, tais que, $\int_A |\phi|^2(x) dx < \infty$, $\int_A |\psi|^2(x) dx < \infty$, nós definimos $\langle \phi, \psi \rangle = \int_A \phi(x) \overline{\psi(x)} dx$. Neste caso $|\phi| = \sqrt{\int_A |\phi(x)|^2 dx}$.

Este espaço também é de Hilbert e tem dimensão infinita.

3) Seja M uma variedade diferenciável de dimensão n e uma forma volume dx (ver [181] ou [169] para definição e propriedades). Denote também por dx sua extensão a uma medida de Lebesgue em M . Então consideraremos $\mathcal{H} = \mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(M)(dx)$. Para $\phi : M \rightarrow \mathbb{C}$, e $\psi : M \rightarrow \mathbb{C}$, tais que, $\int_M |\phi|^2(x) dx < \infty$, $\int_M |\psi|^2(x) dx < \infty$, nós definimos $\langle \phi, \psi \rangle = \int_M \phi(x) \overline{\psi(x)} dx$. Neste caso $|\phi| = \sqrt{\int_M |\phi(x)|^2 dx}$.

Um caso particularmente interessante é o toro de dimensão n que pode ser descrito por $[0, 2\pi]^n \subset \mathbb{R}^n$ onde os pontos da fronteira são identificados da forma usual. Neste caso, se toma dx como a medida usual de Lebesgue em $[0, 2\pi]^n \subset \mathbb{R}^n$ (algumas vezes dividida por $(2\pi)^n$ para ser normalizada). Por exemplo, o círculo S^1 será identificado com $[0, 2\pi]$.

Note que para $\lambda \in \mathbb{C}$, and, $\phi, \psi \in \mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$, vale

$$\langle \lambda \phi, \psi \rangle = \lambda \langle \phi, \psi \rangle$$

e

$$\langle \phi, \lambda \psi \rangle = \bar{\lambda} \langle \phi, \psi \rangle .$$

Observação: Se para v_1, v_2 fixos, vale que para todo v

$$\langle v_1, v \rangle = \langle v_2, v \rangle ,$$

ou, de forma equivalente se vale que

$$\langle v_1 - v_2, v \rangle = 0 ,$$

então $v_1 = v_2$.

De fato, tome $v = v_1 - v_2$, e então, se $v_1 - v_2 \neq 0$, temos contradição (porque $\langle v, v \rangle = 0$, se e só se, $v = 0$).

Uma função $L : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ é linear se para qualquer $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}$ e $v_1, v_2 \in \mathcal{H}_1$, vale

$$L(\alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2) = \alpha_1 L(v_1) + \alpha_2 L(v_2).$$

Dados dois espaços de Hilbert complexos \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 , uma função linear $L : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$, é denominado de Operador Linear.

Dados dois operadores lineares $L_1 : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$, e $L_2 : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_3$, fica bem definida a composta $L = L_2 \circ L_1$, onde $L : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_3$. Note que L também é linear. As vezes se escreve $L_2 L_1$ para representar $L_2 \circ L_1$.

Note que nem sempre $L_2 \circ L_1 = L_1 \circ L_2$, mesmo quando $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_3$.

O operador identidade $I : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ é aquele que para cada $x \in \mathcal{H}$ temos que $I(x) = x$.

Note que para qualquer operador linear $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ vale que $AI = A = IA$.

Dado $L : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, e $n > 0$, temos que $L^n : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ denota a composição de L consigo mesmo n vezes. Note que $L^n \circ L^m = L^{n+m}$. De forma consistente com esta propriedade denotamos $L^0 = I$.

Dado o operador linear $L : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$, dizemos que o operador linear $G : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_1$, é o inverso de L se $G \circ L = I = L \circ G$. De forma um pouco mais precisa: $G \circ L = I_1$ onde I_1 é o operador

identidade em \mathcal{H}_1 , e $L \circ G = I_2$ onde I_2 é o operador identidade em \mathcal{H}_2 .

O operador inverso de L é denotado por L^{-1} . Se L tem inverso dizemos que ele é inversível. A composta de operadores inversíveis é inversível. Mais exatamente, neste caso $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$.

Dado o operador linear $L : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ o núcleo de L é o conjunto dos $v \in \mathcal{H}_1$ tais que $L(v) = 0$. O operador L é injetivo se e só se o núcleo de L é só o vetor 0.

A imagem de $L : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ é o conjunto dos vetores da forma $L(v) \in \mathcal{H}_2$ quando v varia em todo domínio \mathcal{H}_1 . Dizemos que L é sobrejetivo se a imagem de L é todo \mathcal{H}_2 .

L tem inversa se e só se L é injetivo e sobrejetivo.

Vamos considerar abaixo dois espaços de Hilbert \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 , com os respectivos produtos internos \langle, \rangle_1 e \langle, \rangle_2 , e as respectivas normas $\| \cdot \|_1$ e $\| \cdot \|_2$.

Note que segue da última observação acima que se dois operadores lineares $L_1 : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$, e $L_2 : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$, forem tais que, para todo $v_1 \in \mathcal{H}_1, v_2 \in \mathcal{H}_2$ vale

$$\langle L_1(v_1), v_2 \rangle = \langle L_2(v_1), v_2 \rangle,$$

então $L_1 = L_2$.

De fato, para cada v_1 fixo, aplique o resultado acima para todos os v_2 possíveis. Segue que $L_1(v_1) = L_2(v_1)$.

Definição 1.3. O operador linear $L : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ é dito limitado (ou, contínuo) se

$$\sup_{v \neq 0} \frac{\|L(v)\|_2}{\|v\|_1} < \infty.$$

Denominamos de $\mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ o espaço vetorial dos Operadores Lineares limitados de \mathcal{H}_1 em \mathcal{H}_2 . Ainda, $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ denota os Operadores Lineares limitados de \mathcal{H} em \mathcal{H} .

Denotamos por $\mathcal{L}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ o espaço vetorial complexo de todos os operadores lineares de \mathcal{H}_1 para \mathcal{H}_2 .

Em dimensão infinita, nem sempre um operador linear é uma função contínua (usando as normas correspondentes).

Definição 1.4. Seja $L : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$. O valor $\sup_{v \neq 0} \frac{|L(v)|_2}{|v|_1}$ é denotado por $|L|$ e é chamado de norma do operador L em $\mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$.

No espaço vetorial $\mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ o sentido de convergência de elementos $A_n \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2) \rightarrow A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ pode ter vários sentidos, mas aqui dizemos que $\lim_{n \rightarrow \infty} A_n = A$ no sentido da convergência na norma se $\lim_{n \rightarrow \infty} |A_n - A| = 0$.

Um fato importante é que $\mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ munido desta norma de operadores é um espaço completo [241]. Assim, dada uma sequência de operadores $L_n \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ tal que $\sum_{n=0}^{\infty} |L_n| < \infty$, então o somatório $\sum_{n=0}^{\infty} L_n = L$ para um único $L \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$.

Note que para todo $L \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ vale que $|L^n| \leq |L|^n$.

Segue disto que todo operador limitado é contínuo, isto é, se $x_n \rightarrow x$ quando $n \rightarrow \infty$, então, $L(x_n) \rightarrow L(x)$ quando $n \rightarrow \infty$.

A composta de operadores limitados é um operador limitado.

Finalmente, \mathcal{H}^* denota o conjunto dos operadores lineares limitados $L : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$. Para cada $L \in \mathcal{H}^*$ existe um único $u \in \mathcal{H}$, tal que para todo $v \in \mathcal{H}$, vale $L(v) = \langle v, u \rangle$ (ver Theorem 4.12 in [245] ou [248]).

Definição 1.5. Dado $L \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ existe um único operador $L^* \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_2, \mathcal{H}_1)$ tal que para qualquer $u \in \mathcal{H}_2, v \in \mathcal{H}_1$ vale

$$\langle L(v), u \rangle_2 = \langle v, L^*(u) \rangle_1 .$$

O operador L^* existe pelo parágrafo anterior e é denominado de adjunto de L .

Segue da definição que se $A, B \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$, então $(A + B)^* = A^* + B^*$.

Note ainda que se $A, B \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_1)$, então $(AB)^* = B^* A^*$.

Seja $(a + bi)$ matriz um por um, que age em \mathbb{C} . Então, $(a + bi)^* = (a - bi)$.

Ainda, $((a + bi)A)^* = (a - bi)A^*$.

Pode-se mostrar que a igualdade $|L| = |L^*|$ vale para operadores limitados (use a desigualdade de Cauchy-Schwartz para o produto interno $\langle v, L L^*(v) \rangle$ e o fato que $|L L^*| \leq |L| |L^*|$). Assim,

$|L_1^* - L_2^*| = |L_1 - L_2|$. Portanto a função $L \rightarrow L^*$ é contínua quando restrita ao operadores limitados (e usando a norma de operadores).

Dado um subespaço linear fechado M de \mathcal{H} denominamos de M^\perp , o conjunto dos vetores v de \mathcal{H} , tal que, para todo u em M vale que $\langle u, v \rangle = 0$.

Todo $v \in \mathcal{H}$ pode ser escrito de maneira única como $v = u_1 + u_2$, onde $u_1 \in M$ e $u_2 \in M^\perp$. Podemos definir $P_M(v) = u_1$. Isto define um operador limitado com norma 1 que é denominado a projeção ortogonal de v sobre M . Note que $P_M^2 = P_M \circ P_M = P_M$. Ainda, vale que $P_M^* = P_M$.

Um operador P que satisfaz $P^2 = P$ é chamado de operador projeção.

Definição 1.6. Um operador P em $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ que satisfaz $P^2 = P \circ P = P^*$ e $P = P^*$ é denominado genericamente de operador de projeção ortogonal.

Pode se mostrar que dado tal P existe M subespaço linear fechado tal que $P = P_M$.

Exemplo 1.1. Dado $\lambda \in \mathbb{R}$, considere o operador $P_\lambda : \mathcal{L}^2(\mathbb{R})(dx) \rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R})(dx)$, tal que para $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})(dx)$, temos que por definição $P_\lambda(\psi) = I_{(-\infty, \lambda)} \varphi$, onde, $I_{(-\infty, \lambda)}$ é o indicador do intervalo $(-\infty, \lambda)$.

É fácil ver que P_λ é um operador de projeção ortogonal.

Definição 1.7. Um operador L em $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ é dito autoadjunto se $L = L^*$.

Também é usual a nomenclatura operador Hermitiano (estamos considerando no texto espaços vetoriais sobre o corpo dos complexos)

A soma de operadores autoadjuntos é autoadjunto. **A composição de operadores autoadjuntos não é autoadjunto.** Isto é válido somente se os operadores comutam. Se L é autoadjunto e β é real, então, βL é autoadjunto.

Definição 1.8. Um operador U em $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ é dito unitário se ele satisfaz $U^* \circ U = I = U \circ U^*$.

Sendo assim U é inversível e $U^{-1} = U^*$. Note que se U é unitário, então, para todo $v \in \mathcal{H}$, vale que $|v| = |U(v)|$.

De fato,

$$\begin{aligned} |v|^2 &= \langle v, v \rangle = \langle I(v), v \rangle = \\ &= \langle (U^* \circ U)(v), v \rangle = \langle U(v), U(v) \rangle = |U(v)|^2. \end{aligned}$$

A composição de operadores unitários é unitário. Se U é unitário e $\beta \in \mathbb{C}$ tem norma 1, então, βU é unitário.

Definição 1.9. Dado um operador $L : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, dizemos que $\lambda \in \mathbb{C}$ é autovalor se existe $v \neq 0$, $v \in \mathcal{H}$, tal que, $L(v) = \lambda v$. Neste caso dizemos que v é autovetor associada ao autovalor λ .

A multiplicidade de um autovalor é a dimensão do espaço vetorial dos autovetores associados a este autovalor.

Exemplo 1.2. Suponha que $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$.

A matriz

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}$$

é unitaria.

Seus autovalores e autovetores são

$$\frac{\sqrt{2}}{2}(1 - i), \text{ com autovetor } (-1, 1)$$

$$\frac{\sqrt{2}}{2}(1 + i), \text{ com autovetor } (1, 1)$$

Num certo sentido, como veremos mais tarde, os operadores lineares auto-adjuntos correspondem aos números reais e os unitários aos números complexos de norma 1.

Um operador autoadjunto limitado $L : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ num espaço de Hilbert de dimensão infinita pode não possuir autovalores.

Definição 1.10. Chamamos de espectro de $L : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, o conjunto

$$\sigma(L) = \{\lambda \in \mathbb{C} \text{ tais que } (L - \lambda I) \text{ não tem inversa em } \mathcal{B}(\mathcal{H})\}.$$

Um autovalor λ está sempre no espectro (o núcleo de $(L - \lambda I)$ não é so o vetor 0).

Algumas vezes λ está no espectro porque $(L - \lambda I)$ não tem inversa; algumas vezes λ está no espectro porque $(L - \lambda I)$ tem inversa mas $(L - \lambda I)^{-1}$ não é um operador limitado.

Dizemos que o autovalor é isolado se existe um intervalo aberto que o contem que não possui outros elementos do espectro. Se \mathcal{H} tem dimensão finita o espectro são apenas os autovalores e todos são isolados (um autovalor pode não ter multiplicidade um é claro).

Definição 1.11. O conjunto dos autovalores de L que são isolados do espectro e de multiplicidade finita é denominado de espectro pontual de L e denotado por $\sigma_p(L)$.

No caso em que $\mathcal{H} = \mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$ o autovetor é chamado de autofunção.

Seja o espaço de Hilbert complexo $\mathcal{H} = \mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2([0, 2\pi])(dx)$ e L o operador tal que para uma $\psi : [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{C}$ temos $L(\psi) = \phi$, onde $\phi(x) = \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2}$. Mais precisamente, se $\psi(x) = a(x) + i b(x)$, temos que $L(\psi)(x) = \frac{d^2 a(x)}{dx^2} + i \frac{d^2 b(x)}{dx^2}$. Este operador L não está definido para todo ψ em $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2([0, 2\pi])(dx)$, mas apenas para as funções ψ que são duas vezes diferenciáveis (e a segunda derivada está em $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2([0, 2\pi])(dx)$). O conjunto de tais funções define um conjunto denso em $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2([0, 2\pi])(dx)$. É usual na teoria, como veremos, que os operadores mais importantes estão definidos num domínio denso no espaço de Hilbert.

Para um $n \in \mathbb{Z}$ fixo tome $\psi_n(x) = e^{i n x} = \cos(n x) + i \text{sen}(n x)$. É fácil ver que $L(\psi_n) = -n^2 \psi_n$. Assim, cada ψ_n é uma autofunção para L . Observe que os ψ_n , $n \in \mathbb{Z}$, definem os elementos em que se expressa a Série de Fourier na sua forma complexa (ver [39] ou [265]).

O autovalor $-n^2$ tem multiplicidade (complexa) igual a 2.

Outro exemplo: seja o espaço de Hilbert real $\mathcal{H} = \mathcal{L}_{\mathbb{R}}^2([0, 2\pi])(dx)$ e L o operador tal que para uma $\psi : [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{R}$ temos $L(\psi) = \phi$, onde $\phi(x) = -\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2}$. Observe que para cada $n \in \mathbb{N}$ fixo temos que $L(\cos(n x)) = n^2 \cos(n x)$. Ainda, $L(\text{sen}(n x)) = n^2 \text{sen}(n x)$. Note, neste caso, que uma função qualquer ϕ em $\mathcal{L}_{\mathbb{R}}^2([0, 2\pi])(dx)$ pode ser expressa em Série de Fourier na sua forma real (em função de seno e cosseno) conforme [39] ou [265].

O autovalor n^2 , $n \geq 1$, tem multiplicidade (real) igual a 2.

Se pode escrever qualquer $\phi : [0, 2\pi) \rightarrow \mathbb{C}$ que esteja no espaço $L^2([0, 1], \mathbb{C})$ na forma

$$\phi = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \alpha_n e^{i n x} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^{n=N} \alpha_n e^{i n x}.$$

onde $\alpha_n \in \mathbb{C}$.

O conjunto das funções $e^{i n x}$, $n \in \mathbb{Z}$, formam um conjunto ortonormal completo no espaço de Hilbert $L^2([0, 1], \mathbb{C})$.

É claro que para tal operador L temos que $\sigma_p(L) \subset \sigma(L)$ pois, se $\lambda \in \sigma_p(L)$, então $(L - \lambda I)$ não tem inversa.

Definição 1.12. Os elementos do espectro que não fazem parte do espectro pontual constituem o que se denomina espectro contínuo.

Definição 1.13. O complemento do espectro é chamado de resolvente e denotado por $\rho(L)$.

Para todo λ no resolvente temos que $(L - \lambda I)^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$.

Referimos o leitor a seção 4 em [14] ou cap. 2 em [57] para mais detalhes sobre os tópicos acima. Estes conceitos serão considerados mais tarde para operadores L não limitados.

Se L é autoadjunto então os autovalores λ de L são reais. De fato, note que se $L(v) = \lambda v$, deduzimos que

$$\langle L(v), v \rangle = \langle \lambda v, v \rangle = \lambda |v|^2,$$

e

$$\langle L(v), v \rangle = \langle L^*(v), (v) \rangle = \langle v, L(v) \rangle = \langle v, \lambda v \rangle = \bar{\lambda} |v|^2.$$

O Teorema Espectral no caso de dimensão finita (ver [178]) afirma o seguinte: se $L : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ é autoadjunto, então existem n vetores $v_1, v_2, \dots, v_n \in \mathbb{C}^n$, e valores reais $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, tais que $L(v_j) = \lambda_j v_j$, $j = 1, 2, \dots, n$.

Ainda, v_1, v_2, \dots, v_n geram \mathbb{C}^n . Além disso, $\langle v_j, v_k \rangle = 0$, para $j \neq k$.

Existem versões deste teorema para operadores autoadjuntos em espaços de Hilbert de dimensão infinita (ver [241]). Na seção 2.1 de [189] este resultado desempenha um papel fundamental.

Se U é unitário então os autovalores λ de U são números complexos de norma igual a 1. De fato, note que se $U(v) = \lambda v$, para $v \neq 0$, então

$$\begin{aligned} |v|^2 &= \langle v, v \rangle = \langle U^* \circ U(v), v \rangle = \langle U(v), U(v) \rangle = \\ &\langle \lambda v, \lambda v \rangle = \lambda \bar{\lambda} |v|^2 = |\lambda|^2 |v|^2. \end{aligned}$$

Uma versão do Teorema Espectral é válido para os operadores unitários (ver [178] no caso de dimensão finita).

Note que para um operador auto-adjunto os autovetores associados a autovalores distintos são ortogonais. De fato, suponha que $L(v_1) = \lambda_1 v_1$ e $L(v_2) = \lambda_2 v_2$, então como os autovalores são reais

$$\begin{aligned} (\lambda_1 - \lambda_2) \langle v_1, v_2 \rangle &= \\ \langle \lambda_1 v_1, v_2 \rangle - \langle v_1, \lambda_2 v_2 \rangle &= \\ \langle L(v_1), v_2 \rangle - \langle v_1, L(v_2) \rangle &= \\ \langle L(v_1), v_2 \rangle - \langle L(v_1), v_2 \rangle &= 0. \end{aligned}$$

Assim, se $\lambda_1 \neq \lambda_2$, então, $\langle v_1, v_2 \rangle = 0$. Os operadores unitários e auto-adjuntos desempenham um papel importantíssimo na Mecânica Quântica. Vamos precisar em breve de um conceito um pouco mais geral do que o de auto-adjunto.

Definição 1.14. Dizemos que um operador A em $\mathcal{L}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ é compacto se ele leva conjuntos limitados contidos em \mathcal{H}_1 em conjuntos cujo fecho é compacto em \mathcal{H}_2 . O conjunto dos operadores compactos é denotado por $\mathcal{C}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$.

O teorema fundamental para os operadores autoadjuntos compactos, ou seja, $L \in \mathcal{C}(\mathcal{H})$ (ver [141] cap III.3 ou Theorem 4.22 in [64]) ou [219] [220] [157], [281] [57] [241] afirma que existe um conjunto enumerável de autovetores ψ_n , $n \in \mathbb{N}$, associadas a autovalores $\lambda_n \in \mathbb{R}$, dois a dois ortogonais, tais que para qualquer ψ em \mathcal{H} existem $\alpha_n \in \mathbb{C}$, $n \in \mathbb{N}$, tais que

$$\psi = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^n \alpha_j \psi_j.$$

Este conceito não deve ser confundido com o conceito de base de um espaço vetorial (que é sempre relativo a somas finitas).

O complemento do Kernel do operador compacto $L \in \mathcal{C}(\mathcal{H})$ é constituído por um número finito de autofunções ortogonais ψ_j , ou então o conjunto dos infinitos autovalores λ_j , $j \in \mathbb{N}$, se acumula em 0.

Acima utilizamos no limite, é claro, a convergência na norma do espaço de Hilbert.

Pode se assumir que $\langle \psi_n, \psi_n \rangle = 1$ para todo n . Neste caso, dizemos que os ψ_n , $n \in \mathbb{N}$, formam um **conjunto ortonormal enumerável completo de autovetores** de L . No caso em que \mathcal{H} é o espaço vetorial complexo $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$ diremos que os ψ_n , $n \in \mathbb{N}$ formam um **conjunto ortonormal enumerável completo de autofunções (ou autovetores) de L** .

Os operadores autoadjuntos e unitarios agindo em \mathbb{C}^d possuem ambos um conjunto ortonormal (finito) completo de autovetores (Teorema da decomposição espectral conforme [178])

Infelizmente, os operadores naturais na Mecânica Quântica são diferenciáveis (ver a próxima seção) e não são compactos. Mas em muitos casos o inverso G (a direita) deste operador é compacto (ver [141]). Assim, se pode obter para cada autovalor $\beta_n \neq 0$ do operador compacto G obtido acima que seu inverso $\beta_n^{-1} = \lambda_n$, $n \in \mathbb{N}$, é autovalor do operador diferenciável em análise. A autofunção ψ_n , $n \in \mathbb{N}$, (associada a β_n) do operador compacto será também autofunção (associada a $\lambda_n = \beta_n^{-1}$) do operador diferenciável. Referimos o leitor ao cap IV de [141], ou seção 8.1.3 in [50], ou [269], ou [64] para maiores detalhes sobre estas considerações.

Observação: Nem sempre os operadores autoadjuntos que iremos considerar possuem um conjunto orthonormal completo enumerável. O espectro, em geral, não precisa ser constituído só de autovalores e pode ser um conjunto não enumerável. Em alguns casos o operador pode até não possuir autovalor algum. Um resultado importante que iremos utilizar mais tarde se chama o Teorema Espectral para operadores auto-adjuntos não-limitados.

Voltando ao caso que mencionávamos antes, em que existe um conjunto ortonormal enumerável completo de autovetores de L , pode-

mos considerar também a expressão

$$\psi = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^n \langle \psi, \psi_j \rangle \psi_j.$$

Disto vai seguir que (se L é uma função contínua)

$$L(\psi) = L\left(\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^n \alpha_j \psi_j\right) = \lim_{n \rightarrow \infty} L\left(\sum_{j=0}^n \alpha_j \psi_j\right)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^n \alpha_j \lambda_j \psi_j, \quad \text{onde } \alpha_j = \langle \psi, \psi_j \rangle$$

Desta forma a ação de L num vetor qualquer tem uma forma muito simples de ser calculada.

Usaremos, para simplificar a notação, expressões do tipo

$$L\left(\sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j \psi_j\right) = \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j \lambda_j \psi_j,$$

para descrever a passagem dos limites acima.

Note o seguinte fato extremamente importante: dado ψ , ele pode ser escrito como $\sum_{j=0}^{\infty} \alpha_n \psi_n$, onde $\alpha_n \in \mathbb{C}$. Os ψ_n , $n \in \mathbb{N}$, associados aos λ_n são dois a dois ortogonais, assim, se pode mostrar que

$$\langle L(\psi), \psi \rangle = \left\langle L\left(\sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j \psi_j\right), \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j \psi_j \right\rangle =$$

$$\left\langle \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j \lambda_j \psi_j, \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j \psi_j \right\rangle = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_j \alpha_j \bar{\alpha}_j = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_j |\alpha_j|^2 \in \mathbb{R}.$$

Ou seja, **se L é autoadjunto, então $\langle L(\psi), \psi \rangle \in \mathbb{R}$ para qualquer ψ .**

Podemos mostrar isto de outra forma: se L é autoadjunto

$$\overline{\langle L(\psi), \psi \rangle} = \langle \psi, L(\psi) \rangle = \langle L(\psi), \psi \rangle.$$

Note que no exemplo mencionado antes em que $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2([0, 2\pi])(dx)$ e L o operador tal que $L(\psi)(x) = \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2}$, as autofunções ψ_n , $n \in \mathbb{Z}$, associadas ao autovalores n^2 , são tais que qualquer $\phi \in \mathcal{L}^2([0, 2\pi])(dx)$ pode ser expressa em Série de Fourier

$$\phi = \sum_{n \in \mathbb{Z}} a_n \frac{\psi_n}{|\psi_n|} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N a_n \frac{\psi_n}{|\psi_n|},$$

$a_n \in \mathbb{C}$ (ver [39]). Note que $\langle \psi_n, \psi_m \rangle = 0$ para $n \neq m$. Este exemplo ilustra o caso em que existe um conjunto ortonormal completo para um certo operador L .

Lembre que fixado um subespaço fechado F do Espaço de Hilbert \mathcal{H} , a **projeção ortogonal P_F de \mathcal{H} sobre F** foi definida da seguinte forma: seja o subespaço vetorial $F^\perp = \{v \in \mathcal{H} \text{ tais que } \langle v, f \rangle = 0, \text{ para todo } f \in F\}$. Então, \mathcal{H} é soma direta de F e F^\perp . Assim todo vetor $u \in \mathcal{H}$ pode ser escrito de maneira única como $u = v + f$, onde, $v \in F^\perp$ e $f \in F$. Por definição, $P_F(u) = f \in F$.

Note também que $|P_F(u)| = |f| \leq |u|$. Assim, se $F \neq 0$, então P_F é sempre limitado e tem norma igual a 1.

Note que $P_F^2 = P_F$.

Os operadores projeção ortogonal desempenham um papel muito importante na teoria.

Seja $u_1 = v_1 + f_1$ e $u_2 = v_2 + f_2$, $v_i \in F^\perp$ e $f_i \in F$, $i = 1, 2$, como acima. Ora, $\langle P_F(u_1), u_2 \rangle = \langle f_1, v_2 + f_2 \rangle = \langle f_1, f_2 \rangle = \langle v_1 + f_1, f_2 \rangle = \langle u_1, P_F(u_2) \rangle$, sendo assim concluímos que P_F é autoadjunto.

Fixado um elemento ψ de norma 1 no espaço de Hilbert \mathcal{H} , então P_ψ **denota a projeção no espaço vetorial unidimensional \mathcal{Y} gerado por ψ** .

Fizemos a escolha $\langle \lambda u, v \rangle = \lambda \langle u, v \rangle$ e não $\langle u, \lambda v \rangle = \lambda \langle u, v \rangle$, e assim $P_\psi(\phi) = \langle \phi | \psi \rangle \psi = \psi \langle \phi | \psi \rangle$.

De fato na decomposição de $\phi = u + v$, onde $v \in \mathcal{Y}^\perp$ (o subespaço ortogonal ao gerado por ψ) tome $u = \langle \phi | \psi \rangle \psi$ e assim vai decorrer que $v \in \mathcal{Y}^\perp$. De fato, $v = \phi - \langle \phi | \psi \rangle \psi$ e desta forma

$$\langle v, \psi \rangle = \langle \phi - \langle \phi | \psi \rangle \psi, \psi \rangle =$$

$$\langle \phi, \psi \rangle - \langle \langle \phi | \psi \rangle \psi, \psi \rangle =$$

$$\langle \phi, \psi \rangle - \langle \phi | \psi \rangle \langle \psi, \psi \rangle = \langle \phi, \psi \rangle - \langle \phi | \psi \rangle = 0$$

Uma notação muito útil é a seguinte: denotamos vetores v no espaço de Hilbert \mathcal{H} por $\langle v |$. Assim, segundo esta convenção, um operador linear A aplicado a $\langle v |$ resultará (agindo a esquerda) no vetor $\langle A(v) | = \langle v | A$.

A projeção P_ψ , sobre o vetor ψ pode ser expressa na notação de Dirac como

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

agindo em vetores $\langle \phi |$ a esquerda: $\langle \phi | \rightarrow \langle \phi | (|\psi \rangle \langle \psi |)$

$$\text{De fato, } \langle \phi | P_\psi = \langle \phi | \psi \rangle \langle \psi | = \langle \phi | \psi \rangle \langle \psi |.$$

Por exemplo, neste formalismo se pode escrever de maneira natural

$$\begin{aligned} \langle P_\psi(\phi), \theta \rangle &= \langle \langle \phi | \psi \rangle \psi, \theta \rangle = \\ &= \langle \phi, \psi \rangle \langle \psi | \theta \rangle = \langle \phi | |\psi \rangle \langle \psi | |\theta \rangle = \langle \psi | \theta \rangle \langle \phi, \psi \rangle. \end{aligned}$$

Se denomina $\langle \psi |$ de "bra" e $|\psi \rangle$ de "ket". Note que o "bracket" $\langle \psi | \psi \rangle$ é um escalar em \mathbb{C} e o "ket-bra" $|\psi \rangle \langle \psi |$ é um operador.

Esta notação, conhecida como de Dirac, é muito apropriada nos cálculos envolvendo operadores e vetores.

Suponhamos que o operador autoadjunto A é tal que existem ψ_n , $n \in \mathbb{N}$, que formam um conjunto ortonormal completo enumerável. Denote por λ_n os autovalores associados. Então, se pode escrever de maneira sintética

$$A = \sum_n \lambda_n P_{\psi_n} = \sum_n \lambda_n |\psi_n \rangle \langle \psi_n |.$$

Neste formalismo obtemos

$$\begin{aligned} \langle A(\phi) | &= \langle \phi | A = \sum_n \lambda_n \langle \phi | P_{\psi_n} = \\ &= \sum_n \lambda_n \langle \phi | |\psi_n \rangle \langle \psi_n | = \sum_n \lambda_n \langle \phi | \psi_n \rangle \langle \psi_n |. \end{aligned}$$

Ainda,

$$v = \sum_n \langle v | \psi_n \rangle \langle \psi_n |.$$

Desta forma temos uma maneira alternativa de descrever a ação do operador identidade agindo (a esquerda) no vetor $v = \langle v |$ através da expressão

$$\sum_n |\psi_n \rangle \langle \psi_n | = I.$$

O fato acima ocorre **quando existe** um conjunto ortonormal enumerável completo de autofunções de L

Definição 1.15. Dado um operador linear A em $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, onde \mathcal{H} é um espaço de Hilbert (sobre os complexos como sempre), então está bem definido

$$e^A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n.$$

Chama-se e^A de exponencial do operador A .

Isto segue do fato que $|A^n| \leq |A|^n$, para todo n , que $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ é completo e, ainda que, toda série absolutamente convergente em $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ é convergente.

Note que

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} |A^n| \leq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} |A|^n = e^{|A|}.$$

Observe que $e^0 = I$ (o operador identidade).

Se $AB = BA$, então $e^{A+B} = e^A e^B$ (ver [57],[75]). Se $AB \neq BA$, pode acontecer que não seja verdadeira a relação $e^{A+B} = e^A e^B$.

Note que $A(-A) = (-A)A$, e assim

$$e^A e^{-A} = e^{A-A} = e^0 = I = e^{-A} e^A,$$

e portanto para qualquer A temos que e^A é inversível e $(e^A)^{-1} = e^{-A}$.

Seja A em $\mathcal{B}(\mathcal{H})$. Sabe-se [241] [57] que se considerarmos a norma de operadores para considerar o limite na definição de derivada, então

$$\frac{d e^{tA}}{dt} = A e^{tA} = e^{tA} A, \forall t \in \mathbb{R}.$$

Assim, para v fixo em \mathcal{H} temos que

$$\frac{d e^{tA}(v)}{dt} = A e^{tA}(v) \forall t \in \mathbb{R}.$$

Sendo assim, em dimensão finita, isto é quando o operador linear A é descrito pela ação de uma matriz, a solução da equação diferencial linear

$$x'(t) = A x(t), \text{ com a condição inicial } x(0) = v,$$

$$\text{é } x(t) = e^{tA}(v).$$

Outro fato relevante na teoria é que se L é autoadjunto, e, se estiver bem definido $e^{iL} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (iL)^n$, teremos que este último operador é unitário. De fato note que $(iL)^* = -iL^*$, e assim,

$$(e^{iL})^* = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-iL^*)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-iL)^n = e^{-iL}.$$

Como iL comuta com $-iL$, temos que [75]

$$(e^{iL})^* e^{iL} = (e^{-iL}) e^{iL} = e^{-iL+iL} = e^0 = I = e^{iL} (e^{iL})^*.$$

Logo, e^{iL} é unitário se L é autoadjunto. Da mesma forma, dado t real temos que e^{tiL} é unitário se L é autoadjunto. Desta forma para qualquer vetor w temos que $|e^{tiL}(w)| = |w|$ para qualquer $t \geq 0$.

Observe que em dimensão finita, isto é quando o operador linear L é descrito pela ação de uma matriz, a solução da equação diferencial linear

$$x' = iLx, \text{ com a condição inicial } x(0) = v,$$

$$\text{é } x(t) = e^{tiA}(v).$$

Assim, se a condição inicial v satisfaz $|v| = 1$, temos que para todo $t \geq 0$ vale $|e^{tiA}(v)| = 1$. Este fato descreve em termos simplificados a ideia básica por trás da equação de Schrodinger que apresentaremos na próxima seção.

Observe que usamos na demonstração acima o fato que a função $A \rightarrow A^*$ é contínua.

Uma espécie de recíproca do resultado acima e que relaciona operadores autoadjuntos e unitários é o Teorema de Stone que pode ser encontrado em [33].

Observação 1. Para A autoadjunto não limitado podemos definir o seguinte operador limitado:

$$A_\lambda = \frac{1}{2}\lambda^2[(A + i\lambda I)^{-1} + (A - i\lambda I)^{-1}], \quad \lambda > 0.$$

Então, tomando $A_\lambda \rightarrow A$, quando $\lambda \rightarrow \infty$, e usando o fato que A_λ é limitado, podemos definir $e^{A_\lambda} \rightarrow e^A$ via limite (para maiores detalhes ver seção 2.20 proposição 2.52 de [189]).

A solução de $x' = A(x)$, quando A não é limitado, também pode ser obtida via a expressão $x(t) = e^{tA}(x_0)$, onde o exponencial foi definido (via limite em λ) da forma acima.

Se A é da forma $A = \sum_n \lambda_n P_{\psi_n}$, onde $\psi_n, n \in \mathbb{N}$, define um conjunto ortonormal completo, então é fácil ver que $A^2 = \sum_n \lambda_n^2 P_{\psi_n}$. Mais geralmente, $A^k = \sum_n \lambda_n^k P_{\psi_n}$.

Dada um função f em série de potências $f(z) = \sum_k a_k z^k$, com raio de convergência R , se o operador A é limitado e tem norma menor que R , então está bem definido $f(A) = \sum_k a_k A^k$. Isto segue da propriedade $|A^k| \leq |A|^k$, para todo k , e do fato que num espaço normado completo, no caso $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, toda série absolutamente convergente é convergente [145] [75].

Suponha que A tenha decomposição espectral da forma $A = \sum_n \lambda_n P_{\psi_n}$. Segue também que se $f(z)$ é uma função que pode ser escrita em série de potências, então, $f(A) = \sum_n f(\lambda_n) P_{\psi_n}$, contanto que todos $|\lambda_n| < R$.

Assim, o cálculo da exponencial de uma matriz fica mais fácil:

$$e^{iA} = \sum_n e^{i\lambda_n} P_{\psi_n}.$$

Será necessário considerar em breve operadores lineares $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ definidos num subespaço denso do espaço de Hilbert \mathcal{H} . Denotaremos por $D(A) \subset \mathcal{H}$ o correspondente domínio de definição. Se nada for dito ao contrário $D(A) = \{v \text{ tais que } A(v) \in \mathcal{H}\}$. Neste caso, usaremos indistintamente a notação $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, ou, $A : D(A) \rightarrow \mathcal{H}$.

Definição 1.16. $A : D(A) \rightarrow \mathcal{H}$ operador no espaço de Hilbert \mathcal{H} é limitado se existe $C > 0$ tal que $A(v) < C|v|, \forall v \in D(A)$, onde $D(A)$ é um domínio denso em \mathcal{H} .

O seguinte resultado será de grande utilidade (demonstração na proposição 2.50 seção 2.20 em [189]).

Lema 1.1. : *Seja $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, operador linear no espaço de Hilbert \mathcal{H} definido em $D(A)$. Se existe $C > 0$ tal que para qualquer ϕ em $D(A)$ (denso em \mathcal{H}) vale $|A(\phi)| \leq C|\phi|$, então, a ação de A pode ser estendida a \mathcal{H} , também denotada por A , que torna $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ um operador limitado definido em todo \mathcal{H} com norma menor ou igual a C .*

Este lema segue do fato que dados espaços métricos completos M, N , se $S \subset M$ é denso em M , e $f : S \rightarrow N$ é uniformemente contínua, então f se estende a uma função contínua em M (ver [179] para mais detalhes).

Apresentamos uma prova de tal resultado na última seção de [189].

Definição 1.17. Seja $A : D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, operador linear no espaço de Hilbert \mathcal{H} definido em $D(A)$, o adjunto de A é o operador A^* tal que $\langle A^*\psi, \phi \rangle = \langle \psi, A\phi \rangle$, para toda $\phi \in D(A)$, e, para toda $\psi \in D(A^*) = \{\psi \in \mathcal{H} | \langle \psi, A\phi \rangle \leq c_\psi \|\phi\|, \text{ para toda } \phi \in D(A)\}$. Assumimos que $D(A^*)$ é denso em \mathcal{H} .

Dado A o operador A^* definido em $D(A^*)$ fica definido de maneira única.

Definição 1.18. Seja $A : D(A) \rightarrow \mathcal{H}$ e $D(A) = D(A^*)$. A é autoadjunto se $A = A^*$ em $D(A)$.

Definição 1.19. A é simétrico, se $\langle A\psi, \phi \rangle = \langle \psi, A\phi \rangle, \forall \psi, \phi \in D(A)$.

Note que A autoadjunto $\Rightarrow A$ simétrico, e, A autoadjunto $\Leftrightarrow A$ simétrico e $D(A) = D(A^*)$

Vamos apresentar a seguir alguns exemplos de operadores que serão considerados nas próximas seções.

1) A identidade: $I : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, isto é $I(\psi) = \psi$, para todo ψ . Neste caso, o domínio $D(I) = \mathcal{H}$, e I é autoadjunto e limitado.

2) Multiplicação por coordenada:

$$\psi \rightarrow x_j \psi(x) = x_j \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n),$$

$j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$, onde $A : D(A) \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx) \rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$. Usaremos a notação $\mathcal{X}_j : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx) \rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$, $j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$.

De outra forma: fixado j , dado ψ , se dizemos que $\mathcal{X}_j(\psi) = \varphi$, então é porque para todo $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ vale que

$$\varphi(x_1, x_2, \dots, x_n) = x_j \psi(x_1, x_2, \dots, x_n).$$

Neste caso, $D(\mathcal{X}_j) = \{\psi \mid \text{tais que } x_j \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \text{ seja uma função em } \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)\}$.

Por exemplo, para $n = 3$, temos que dado ψ , tal que,

$$(x_1, x_2, x_3) \rightarrow \psi(x_1, x_2, x_3) = \text{sen}(x_1 + x_2 + x_3) e^{-4(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)^6},$$

então, $\mathcal{X}_2(\psi) = \phi$, onde

$$\phi(x_1, x_2, x_3) = x_2 \text{sen}(x_1 + x_2 + x_3) e^{-4(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)^6}.$$

Note que como x_j é sempre um número real, para qualquer $j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$

$$\langle \mathcal{X}_j \psi, \phi \rangle = \int x_j \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \overline{\phi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)} dx = \langle \psi, \mathcal{X}_j \phi \rangle.$$

Logo \mathcal{X}_j é autoadjunto. Claramente \mathcal{X}_j não é limitado. O espectro de \mathcal{X}_j não é enumerável. De fato, todo valor real λ está no espectro, pois, dado ϕ , a função $(\mathcal{X}_j - \lambda I)(\phi)$, necessariamente se anula em $x_j = \lambda$. Assim, $(\mathcal{X}_j - \lambda I)$ não pode ser sobrejetiva.

3) Multiplicação por coordenada: $\psi \rightarrow x_j \psi(x) = x_j \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$, $j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$, onde $A : \mathcal{L}^2([0, 2\pi]^n)(dx) \rightarrow \mathcal{L}^2([0, 2\pi]^n)(dx)$. Usaremos também a notação $\mathcal{X}_j : \mathcal{L}^2([0, 2\pi]^n)(dx) \rightarrow \mathcal{L}^2([0, 2\pi]^n)(dx)$, $j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$. Neste caso, é usual considerar

$$D(A) = \{\psi \in \mathcal{L}^2([0, 2\pi]^n)(dx)\}$$

tais que ψ tem uma extensão contínua a $[0, 2\pi]^n$.

O espaço $(0, 2\pi)^n$ quando se identificam de forma periódica os pontos da fronteira é chamado de toro de dimensão n e denotado por \mathbb{T}^n .

Como x_j é sempre um número real, para qualquer $j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$

$$\langle \mathcal{X}_j \psi, \phi \rangle = \int_{[0, 2\pi]^n} x_j \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \overline{\phi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)} dx = \langle \psi, \mathcal{X}_j \phi \rangle .$$

Logo \mathcal{X}_j é autoadjunto. Claramente \mathcal{X}_j neste caso é limitado.

4) Multiplicação por uma função $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ contínua, ou seja, $\psi \rightarrow V \psi$.

O operador será denotado por \mathcal{V} , onde $\mathcal{V} : D(\mathcal{V}) \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx) \rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$.

De outra forma: dado ψ , se dizemos que $\mathcal{V}(\psi) = \varphi$, então é porque para todo $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ vale que

$$\varphi(x_1, x_2, \dots, x_n) = V(x_1, x_2, \dots, x_n) \psi(x_1, x_2, \dots, x_n).$$

Neste caso, $D(\mathcal{V}) = \{\psi \mid \text{tais que}$

$$V(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$$

seja uma função em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)\}$.

Por exemplo, para $n = 3$, se $V(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 + x_2^4$, então

$$\begin{aligned} \mathcal{V}(\text{sen}(x_1 + x_2 + x_3) e^{-4(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)^6}) = \\ (x_1^2 + x_2^4) \text{sen}(x_1 + x_2 + x_3) e^{-4(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)^6} . \end{aligned}$$

Note que serão necessárias várias restrições a V para que $D(\mathcal{V})$ seja denso. Vamos sempre assumir implicitamente que isto ocorre.

Note que como $V(x)$ é sempre um número real

$$\langle \mathcal{V} \psi, \phi \rangle = \int V(x_1, \dots, x_n) \psi(x_1, \dots, x_n) \overline{\phi(x_1, \dots, x_n)} dx = \langle \psi, \mathcal{V} \phi \rangle .$$

Logo, \mathcal{V} é autoadjunto. Claramente \mathcal{V} é limitado se V é limitada. Se V não é constante, então o espectro de \mathcal{V} não é enumerável. De fato, todo valor real λ na imagem de V está no espectro, pois, dado ϕ , a função $\psi = (\mathcal{V} - \lambda I)(\phi)$, necessariamente se anula em x tal que

$V(x) = \lambda$. Isto, é $\psi(x) = 0$ se $V(x) = \lambda$. Assim, $(\mathcal{V} - \lambda I)$ não pode ser sobrejetiva para tal λ .

É fácil ver que se λ é um número real que está a uma distância positiva da imagem de V , então $(\mathcal{V} - \lambda I)(\phi)$ é injetivo e sobrejetivo.

Suponha que \mathcal{V}_1 denote o operador multiplicação pela função V_1 e \mathcal{V}_2 denote o operador multiplicação pela função V_2 . A composta $\mathcal{V}_2 \mathcal{V}_1$ é dada pela multiplicação pela função $V_2 V_1$. Assim, $\mathcal{X}_1 \mathcal{X}_2$ denota a multiplicação por $x_1 x_2$. O operador multiplicação por $x_1 x_3 + x_2^2$ pode ser descrito pelo operador $\mathcal{X}_1 \mathcal{X}_3 + \mathcal{X}_2^2$.

No mundo clássico os observáveis são descritos por funções $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ e os valores que podem ser observados estão na imagem de V . No mundo quântico os observáveis são descritos por operadores autoadjuntos e os valores observados são os elementos do espectro (ver seções 1.1 e 2.2 de [189]). O exemplo particular acima (onde consideramos o operador \mathcal{V} associado a V) mostra que neste caso esta analogia se encaixa perfeitamente.

5) Multiplicação por $V : [0, 2\pi]^n \rightarrow \mathbb{R}$ contínua e periódica em $[0, 2\pi]^n$, ou seja, $\psi \rightarrow V \psi$. O operador será denotado por \mathcal{V} , onde

$$\mathcal{V} : \mathcal{L}^2([0, 2\pi]^n)(dx) \rightarrow \mathcal{L}^2([0, 2\pi]^n)(dx).$$

Neste caso, $D(\mathcal{V}) = \mathcal{L}^2([0, 2\pi]^n)(dx)$.

Claramente \mathcal{V} é limitado e autoadjunto.

Note que para todo $\psi \neq 0$ vale

$$\frac{|\mathcal{V}\psi|}{|\psi|} = \sqrt{\frac{\langle \mathcal{V}\psi, \mathcal{V}\psi \rangle}{\langle \psi, \psi \rangle}} = \sqrt{\frac{\int_{[0, 2\pi]^n} |V(x_1, \dots, x_n)|^2 |\psi(x_1, \dots, x_n)|^2 dx}{\int_{[0, 2\pi]^n} |\psi(x_1, \dots, x_n)|^2 dx}} \leq \sup_{x \in [0, 2\pi]^n} \{|V(x)|\}.$$

Vai haver uma dramática diferença entre a análise dos autovalores dos operadores autoadjuntos agindo em $\mathcal{L}^2([0, 2\pi]^n)(dx)$ e agindo em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$ (ver [241])

O valor real $\hbar \sim 6.626069... 10^{-34} \frac{m^2 kg}{s}$, é denominado de constante de Planck e desempenha um fundamental na teoria.

5) o operador momento: fixado $j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$, considere $\psi \rightarrow -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_j}$. Note que $\psi(x) = a(x) + i b(x)$ toma valores em \mathbb{C} , e, assim, $\frac{\partial \psi}{\partial x_j} = \frac{\partial a}{\partial x_j} + i \frac{\partial b}{\partial x_j}$ também.

Neste caso, como veremos, o espectro é não enumerável.

Definição 1.20. O j -ésimo operador momento será denotado por \mathcal{P}_j , $j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$, onde $\mathcal{P}_j : D(\mathcal{P}_j) \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx) \rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$,

$$\mathcal{P}_j(\psi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} (\psi).$$

De outra forma: fixado j , dado ψ , se dizemos que $\mathcal{P}_j(\psi) = \varphi$, então é porque para todo $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ vale que

$$\varphi(x_1, x_2, \dots, x_n) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(x_1, x_2, \dots, x_n).$$

Por exemplo, para $n = 3$ temos que

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_2(x_2^2 e^{-(x_1^2+x_2^2+x_3^2)}) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_2} (x_2^2 e^{-(x_1^2+x_2^2+x_3^2)}) = \\ &= -i\hbar [2x_2 e^{-(x_1^2+x_2^2+x_3^2)} - 2x_2^3 e^{-(x_1^2+x_2^2+x_3^2)}]. \end{aligned}$$

Dizemos que ψ é diferenciável com suporte compacto se é diferenciável de classe C^1 , e, ainda quando existe uma bola compacta $\overline{B(R)}$ de raio R tal que ψ seja nula fora desta bola.

Neste caso, $D(\mathcal{P}_j) = \{\psi \mid \text{tais que } \psi \text{ é de classe } C^1 \text{ com suporte compacto (assim, } -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \text{ é uma função em } \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx) \text{)}\}$. Pode se mostrar que $D(\mathcal{P}_j)$ é denso em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$.

Note que esta não é a única escolha de domínio que se vai fixar. Cada escolha de possível domínio vai definir um operador \mathcal{P}_j agindo num espaço de Hilbert \mathcal{H} (o fecho) diferente.

Vamos mostrar que \mathcal{P}_j é simétrico no caso $n = 1$. Assim, $j = 1$. Como ψ tem suporte compacto, existe R tal que, $\psi(x) = 0$, se $|x| > R$.

Resulta da integração em $[-R, R]$ e de

$$\frac{\partial[\psi(x_1)\overline{\phi(x_1)}]}{\partial x_1} = \frac{\partial\psi(x_1)}{\partial x_1} \overline{\phi(x_1)} + \psi(x_1) \frac{\partial\overline{\phi(x_1)}}{\partial x_1},$$

que, para todo $\phi, \psi \in D(\mathcal{P}_1)$ vale

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{P}_1 \psi, \phi \rangle &= \int_{-R}^R -i\hbar \frac{\partial \psi(x_1)}{\partial x_1} \overline{\phi(x_1)} dx = \\ &= \int_{-R}^R \psi(x_1) \overline{-i\hbar \frac{\partial \phi(x_1)}{\partial x_1}} dx = \langle \psi, \mathcal{P}_1 \phi \rangle. \end{aligned}$$

Logo, \mathcal{P}_1 é simétrico. Da mesma forma se mostra que \mathcal{P}_j é autoadjunto (não vamos entrar aqui em questões técnicas, mas é preciso escolher o domínio denso de forma apropriada). O operador \mathcal{P}_j não é limitado. O espectro de \mathcal{P}_j , como veremos, não é enumerável.

Definição 1.21. O operador

$$\mathcal{P} = \sum_{j=1}^n \mathcal{P}_j$$

é chamado de operador momento. Neste caso, $D(\mathcal{P}) = \bigcap_{j=1}^n D(\mathcal{P}_j)$.

6) O operador j -momento ao quadrado: fixado $j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$, considere $\mathcal{P}_j \circ \mathcal{P}_j = \mathcal{P}_j^2$. Neste caso, $\psi \rightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 x_j} = \mathcal{P}_j^2 \psi$.

Definição 1.22. O j -ésimo operador momento ao quadrado será denotado por \mathcal{P}_j^2 , $j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$, onde $\mathcal{P}_j^2 : D(\mathcal{P}_j^2) \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx) \rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$,

$$\mathcal{P}_j^2 \psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial^2 x_j} (\psi).$$

$D(\mathcal{P}_j^2) = \{\psi \text{ é de classe } C^2 \text{ e existe uma bola compacta } \overline{B(R)} \text{ de raio } R \text{ tal que } \psi \text{ é nula fora desta bola}\}.$

De outra forma: fixado j , dado ψ , se dizemos que $\mathcal{P}_j^2(\psi) = \varphi$, então é porque para todo $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ vale que

$$\varphi(x_1, x_2, \dots, x_n) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial^2 x_j} \psi(x_1, x_2, \dots, x_n).$$

\mathcal{P}_j^2 , $j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$, é autoadjunto pois é a composta de operadores autoadjuntos que comutam. O operador \mathcal{P}_j^2 , $j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$, não é limitado.

7)

O operador Δ tal que $f \rightarrow \Delta(f) = \frac{\partial^2}{\partial^2 x_1} f + \dots + \frac{\partial^2}{\partial^2 x_n} f$, quando $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é duas vezes diferenciável é denominado de Laplaciano.

Definição 1.23. O operador momento ao quadrado em \mathbb{R}^n : denote \mathcal{P}^2 o operador

$$\mathcal{P}^2 = \sum_{j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}} \mathcal{P}_j^2,$$

$\mathcal{P}^2 : \cap_j D(\mathcal{P}_j^2) \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx) \rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$. Este operador é autoadjunto por ser a soma de operadores autoadjuntos. Note que

$$\mathcal{P}^2 \psi = -\hbar^2 \Delta \psi,$$

onde Δ é o operador Laplaciano.

O espectro de \mathcal{P}^2 não é enumerável. Uma questão de notação: observe que \mathcal{P}^2 não é $\mathcal{P} \circ \mathcal{P}$. O domínio do operador Laplaciano agindo no espaço de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$ é o conjunto das funções que possuem a segunda derivada em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$.

8) O operador momento ao quadrado em $[0, 2\pi]^n = \mathbb{T}^n$: denote \mathcal{P}^2 o operador $\sum_{j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}} \mathcal{P}_j^2$, assim

$$\mathcal{P}^2 : \cap_j D(\mathcal{P}_j^2) \subset \mathcal{L}^2([0, 2\pi]^n)(dx) \rightarrow \mathcal{L}^2([0, 2\pi]^n)(dx),$$

onde,

$D(\mathcal{P}_j^2) = \{\psi \text{ tem derivada parcial de ordem dois em relação a } j \text{ e é contínua em } (0, 2\pi)^n, \text{ e, ainda, } \psi \text{ tem uma extensão duas vezes diferenciável a } [0, 2\pi]^n\}$.

Este operador é autoadjunto por ser a soma de operadores autoadjuntos. O espectro de \mathcal{P}^2 é enumerável.

No caso $n = 1$ as funções do tipo $\phi_n(x) = e^{n i x}$, $n \in \mathbb{Z}$, são tais que $\mathcal{P}^2 \phi_n = \hbar^2 n^2 \phi_n$. Os $\phi_n(x) = e^{n i x}$, $n \in \mathbb{Z}$, (os elementos da Série de Fourier) formam um conjunto ortonormal completo de autofunções de \mathcal{P}^2 .

9) O operador momento ao quadrado em uma variedade diferenciável Riemanniana compacta M : denote \mathcal{P}^2 o operador $-\hbar^2 \Delta$,

onde o Laplaciano é derivado a partir da estrutura Riemanniana (see [66]).

$$\sum_{j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}} \mathcal{P}_j^2 = \mathcal{P}^2 : D(\mathcal{P}^2) \subset \mathcal{L}^2(M)(dx) \rightarrow \mathcal{L}^2(M)(dx),$$

onde, dx é a extensão a medida de Lebesgue de alguma forma volume em M , e, $D(\mathcal{P}^2) = \{\psi \text{ é de classe } C^2 \text{ em } M, \psi : M \rightarrow \mathbb{C}\}$.

O caso anterior é um caso particular deste.

O espectro de \mathcal{P}^2 é enumerável. No caso de superfícies compactas de curvatura negativa existem questões interessantes que relacionam os autovalores de $-\hbar^2 \Delta$ (ou, Δ) com o espectro de comprimentos das geodésicas periódicas via funções Zeta (ver [261]). A análise do limite semiclássico é um tópico muito estudado neste caso (ver [35], [12] e [131]).

O fluxo geodésico descreve o sistema clássico associado (ver [184]).

Agora apresentamos nosso último exemplo.

10)

Definição 1.24. Um operador integral $\mathcal{K} : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx) \rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dy)$ é aquele que pode se expresso por

$$\mathcal{K} : \psi \rightarrow \int K(x, \cdot) \psi(x) dx,$$

onde $K(x, y)$ é uma função contínua.

Mais precisamente, dizemos que $\mathcal{K}(\psi) = \phi$, quando vale que $\phi(y) = \mathcal{K}(\psi)(y) = \int K(x, y) \psi(x) dx$.

Observe que tal \mathcal{K} descreve uma transformação linear.

Se K for uma função limitada então \mathcal{K} é operador limitado. Neste caso, $D(\mathcal{K}) = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$. Referimos o leitor a [14] para resultados gerais sobre operadores integrais.

$K(x, y)$ é chamado de núcleo (ou, kernel) integral do operador \mathcal{K} .

Se K é tal que $K(x, y) = K(y, x)$, e toma valores reais, então, \mathcal{K} é autoadjunto.

De fato, isto segue de

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{K}\psi, \phi \rangle &= \int \int K(x, y) \psi(x) \overline{\phi(y)} dx dy = \\ &= \int \int \psi(x) \overline{K(y, x) \phi(y)} dx dy = \langle \psi, \mathcal{K}\phi \rangle. \end{aligned}$$

Da expressão acima segue que bastaria a igualdade $K(x, y) = \overline{K(y, x)}$ para \mathcal{K} ser autoadjunto.

Finalmente:

Teorema 1.2. *Supondo K limitada, se $\int \int |K(x, y)|^2 dx dy < \infty$, então o operador \mathcal{K} é compacto.*

Assim, pelo Teorema da decomposição espectral vai possuir um conjunto ortonormal completo enumerável de autovetores (seção X.2 [281]).

Proposição 1.3. *Se \mathcal{K}_1 e \mathcal{K}_2 são operadores integrais (com núcleos K_1 e K_2 respectivamente), então o núcleo integral de $\mathcal{K} = \mathcal{K}_1 \mathcal{K}_2$ é*

$$K(x, y) = \int_{\mathbb{R}^n} K_1(x, z) K_2(z, y) dz. \quad (1.1)$$

De fato, dado ψ note que

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_1 \mathcal{K}_2(\psi)(x) &= \int K_1(x, z) [\mathcal{K}_2(\psi)(z)] dz = \\ &= \int K_1(x, z) \left[\int K_2(z, y) \psi(y) dy \right] dz = \\ &= \int \left[\int K_1(x, z) K_2(z, y) dz \right] \psi(y) dy. \end{aligned}$$

Observe que a ação de um operador integral é uma extensão natural da idéia de descrever uma transformação linear pela ação de uma matriz. De fato, se em vez de $x, y \in \mathbb{R}$ considerassemos $i, j \in \{1, 2, \dots, d\}$, então $K(x, y)$ corresponde a matriz $A_{i,j}$, $i, j \in \{1, 2, \dots, d\}$. A matriz A agindo num vetor (v_1, v_2, \dots, v_d) resulta num vetor (u_1, u_2, \dots, u_d) .

Assim $\phi(y) = \mathcal{K}(\psi)(y) = \int K(x, y)\psi(x)dx$, corresponde a $u_j = \sum_{i=1}^d A_{i,j}v_i$.

Nesta associação seria natural pensar que o traço da matriz A , ou seja, $\sum_{i=1}^d A_{i,i}$ corresponde a $\int K(x, x)dx$. O traço do operador \mathcal{K} resulta num conceito extremamente importante na teoria como veremos. Como veremos na seção 9 esta analogia de fato não é apenas uma mera formalidade para certas classes de operadores integrais (ver [14]).

Definição 1.25. Um operador autoadjunto A é positivo (denotamos tal fato por $A \geq 0$), se $\langle \psi, A\psi \rangle \geq 0$, $\forall \psi \in D(A)$. Um operador autoadjunto A é estritamente positivo se $\langle \psi, A\psi \rangle > 0$, $\forall \psi \in D(A)$, $\psi \neq 0$.

Um operador autoadjunto positivo tem apenas autovalores não-negativos. De fato, $0 \leq \langle \psi, A(\psi) \rangle = \langle \psi, \lambda \psi \rangle = \lambda \langle \psi, \psi \rangle$.

Exemplo 1.3. Suponha que $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$.

A matriz

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}i \\ \frac{1}{\sqrt{2}}i & 1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

é autoadjunta é positiva. Seus autovalores são positivos e somam 1.

Vamos mostrar que, por exemplo, \mathcal{P}_j^2 , $j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$, é positivo. A prova sera feita para o caso $n = 1$. Assim abaixo $x_1 = x$.

Note que por integração por partes (para $\frac{\partial}{\partial x_1} [\frac{\partial \psi(x_1)}{\partial x_1} \overline{\psi(x_1)}]$)

$$\langle \mathcal{P}_1^2 \psi, \psi \rangle = \int_{-R}^R -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(x_1)}{\partial^2 x_1} \overline{\psi(x_1)} dx = \int_{-R}^R \hbar^2 \frac{\partial \psi(x_1)}{\partial x_1} \overline{\frac{\partial \psi(x_1)}{\partial x_1}} dx > 0.$$

Note que como ψ tem suporte compacto, se $\frac{\partial \psi}{\partial x_1} = 0$, para todo x_1 , então, $\psi = 0$.

Segue do demonstrado acima que \mathcal{P}^2 é também estritamente positivo.

De maneira mais geral, se A é autoadjunto, então A^2 é sempre positivo. De fato

$$\langle A^2(\psi) \psi \rangle = \langle A(\psi), A^*(\psi) \rangle = \langle A(\psi), A(\psi) \rangle \geq 0.$$

Assim, o resultado mencionado anteriormente segue de tomar $A = \mathcal{P}_j$ e usar o raciocínio acima.

Segue da mesma forma que todo operador projeção P_F é positivo porque $P_F = P_F^2$.

Na álgebra dos operadores $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, os operadores autoadjuntos desempenham o papel dos números reais (dentro da álgebra dos complexos \mathbb{C}). Os da forma A^2 desempenham o papel dos números reais não negativos. Os unitários desempenham o papel dos números complexos de norma 1. Se A é autoadjunto e positivo, existe B tal que $B^2 = A$ [245] [281]. Ou seja, que A possui "raiz quadrada". É fácil deduzir este fato se A é da forma $A = \sum_n \lambda_n P_{\psi_n}$. Basta tomar $B = \sum_n \sqrt{\lambda_n} P_{\psi_n}$.

Denotamos por $\nabla\psi = \nabla_x\psi$, a expressão

$$\nabla\psi(x) = \left(\frac{\partial\psi(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial\psi(x)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial\psi(x)}{\partial x_n} \right).$$

Capítulo 2

Estados e a equação de Schrödinger

Para o leitor apreciar a diferença do setting Clássico e Quântico saiba que:

1) $M =$ massa do Sol $= 1,99 \cdot 10^{30} Kg$ e $D =$ distancia Terra-Sol: 149.597.891 km

Razão $M/D = 10^{22} g/m$.

2) $m =$ massa do núcleo do Hidrogênio $= 1,67 \cdot 10^{-27} Kg$ e $d =$ raio da primeira órbita do elétron $= 0,53 \cdot 10^{-10} m$

Razão $m/d = 10^{-14} g/m$.

É este quociente de escalas de unidade de medida que vai determinar a natureza do problema. No segundo caso não teremos mais uma descrição determinística mas sim estatística. As "forças" (o que existe na verdade seria "em termos" menos o gradiente do potencial) que agem ao nível quântico são de intensidade bem distinta das que agem ao nível clássica (interação gravitacional do Sistema Terra-Lua, por exemplo).

Se o sistema físico a ser analisado for governado pelo Hamiltoniano,

$$H(x, p) = \frac{|p|^2}{2m} + V(x) = \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m} + V(x),$$

$x, p \in \mathbb{R}^3$, mas para uma massa m muito pequena, então não valem mais as leis da Mecânica Clássica, e sim as leis da Mecânica Quântica. Vamos elaborar um pouco sobre esta afirmação.

No setting clássico $\frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m}$ é o termo de energia cinética e $V(x)$ o termo de energia potencial. Assim o Hamiltoniano $H(x, p)$ é a soma destas duas energias. Desta forma H descreve a energia total.

A partícula é descrita na Mecânica Clássica de forma determinística pela trajetória $(x(t), p(t))$ que satisfaz a **equação de Hamilton**

$$x'_j(t) = \frac{\partial H(x, p)}{\partial p_j}, \quad p'_j(t) = -\frac{\partial H(x, p)}{\partial x_j}, \quad j \in \{1, 2, 3\},$$

com condição inicial $(x(t_0), p(t_0)) = (x_0, p_0)$ (ver [7], [184], [290] ou [2]).

Suponha que a força $F(x)$ satisfaça a equação $-\frac{\partial V(x)}{\partial x} = F(x)$ para todo x . Neste caso dizemos que a força deriva do potencial V .

Note que a expressão da equação diferencial acima apenas afirma que $p(t) = mx'(t)$ e que $p'(t) = F(x(t))$. Ou seja, afirma que $mx''(t) = F(x(t))$, expressão esta que descreve a conhecida Lei de Newton.

Dizemos que x descreve a posição da partícula e que p descreve o momento da partícula. Note que o momento, neste caso, é a massa vezes a velocidade da partícula.

Em resumo, na Mecânica Clássica se a partícula no tempo t_0 esta em $(x_0, p_0) \in \mathbb{R}^6$, ela então estará, de forma determinística, no tempo t em $(x(t), p(t)) \in \mathbb{R}^6$, seguindo o caminho $(x(t), p(t))$ que satisfaz a equação de Hamilton (uma equação diferencial ordinária de primeira ordem em \mathbb{R}^6)

$$x'_j(t) = p_j(t) \quad \text{e} \quad p'_j(t) = -\frac{\partial V(x)}{\partial x_j}, \quad j \in \{1, 2, 3\}.$$

No caso em que $H(x, p) : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ e $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, onde $V : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, então a equação de Hamilton é

$$x'(t) = p(t) \quad \text{e} \quad p'(t) = -\frac{dV(x)}{dx}.$$

Por exemplo, no caso unidimensional quando $H(x, p) = \frac{p^2}{2} + \frac{x^2}{2}$ temos que $(x(t), p(t)) = R(\cos t, -\sin t)$, $R > 0$, descreve distintas soluções da equação de Hamilton.

Na Mecânica Clássica os valores da energia varrem um contínuo de possibilidades, ou seja, os valores de $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$. Uma propriedade importante é a conservação de energia total: se $(x(t), p(t))$ satisfaz a equação de Hamilton para um dado Hamiltoniano H , então, $H(x(t), p(t))$ é constante (isto é, não depende de t).

Na Mecânica Hamiltoniana as variáveis x e p estão em igualdade de condições (coisa que não acontece com x e $v = x'$ na Mecânica Lagrangiana). Esta desvinculação de x e p está, de certa forma, dentro do espírito dos fundamentos da Mecânica Quântica.

Na Mecânica Quântica só vamos considerar, inicialmente, a posição x da partícula. Esta vai ser descrita via a probabilidade de encontrá-la numa certa região do espaço num **certo determinado tempo**.

A descrição no sentido quântico de uma densidade associada ao momento p será analisada mais tarde.

Considere $\mathcal{H} = \mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$ (onde dx é a integração usual em \mathbb{R}^3) que é o conjunto das funções $\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$, tais que $\int |\psi(x)|^2 dx = \int |\psi(x_1, x_2, x_3)|^2 dx_1 dx_2 dx_3 < \infty$. Neste espaço consideramos o produto interno definido por $\langle \phi, \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \phi(x)\bar{\psi}(x)dx$ [57] [245].

Uma função $\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ em $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$ tal que $|\psi| = 1$ será chamado de **estado** (ou, função de onda). Ele é uma entidade matemática que vai descrever a aleatoriedade de uma entidade física que é a partícula quântica.

A distribuição da posição espacial $x = (x_1, x_2, x_3)$ da partícula quântica vai ser descrita pela densidade $|\psi(x_1, x_2, x_3)|^2$.

Considere uma família $\psi_t : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$, indexada pelo tempo t , em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$ tal que

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi_t(x_1, x_2, x_3)|^2 dx_1 dx_2 dx_3 = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi_t(x)|^2 dx = 1,$$

para todo t .

Gostaríamos que a probabilidade de encontrar a posição $x = (x_1, x_2, x_3)$ da partícula em $(a_1, b_1) \times (a_2, b_2) \times (a_3, b_3)$, no tempo t , fosse expressa por

$$P(X_t \in (a_1, b_1) \times (a_2, b_2) \times (a_3, b_3)) = \int_{(a_1, b_1) \times (a_2, b_2) \times (a_3, b_3)} |\psi_t(x)|^2 dx.$$

A família $\psi_t(x)$, $t \geq 0$, vai descrever a evolução temporal da partícula, ou seja, para cada tempo t , vamos obter a densidade que descreve a posição espacial da partícula.

Isto de fato é possível, mas a questão é como determinar tal ψ_t . Note que desejamos encontrar ψ_t que descreve o **fenômeno físico observado na natureza** ao longo do tempo determinístico t .

Definição 2.1. Um elemento genérico em ψ em $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^3)(dx)$, tal que $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$, será denominado de estado, ou, função de onda. Assim, ψ_t , $t \geq 0$, é o estado no tempo t .

Destacamos o fato fundamental de que, embora o objetivo seja descrever a probabilidade (da posição espacial) da partícula no tempo t estar em $(a_1, b_1) \times (a_2, b_2) \times (a_3, b_3)$, via

$$\int_{(a_1, b_1) \times (a_2, b_2) \times (a_3, b_3)} |\psi_t(x)|^2 dx,$$

todo o procedimento que será descrito abaixo envolve a ψ_t e não a $|\psi_t|^2$. Vamos dizer de qualquer forma, de maneira vaga, que $\psi(t)$ descreve a probabilidade da posição x da partícula no tempo t . Observe que $\psi(t)$ e $\psi(t)e^{i\alpha t}$, $\alpha \in \mathbb{R}$, irão descrever a mesma probabilidade (quando tomarmos o módulo e elevarmos ao quadrado).

Ou seja, existe uma ambiguidade no estado $\psi \sim \psi e^{i\theta}$ com θ real.

No texto V é sempre uma função real.

Suponha que a partícula em análise está sob a influência de um potencial $V(x)$. Como determinar ψ_t , $t \geq 0$? A equação fundamental da $\psi_t(x) = \psi(t, x)$ na Mecânica Quântica é dada pela **equação de Schrödinger**:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x \psi(t, x) + V(x) \psi(t, x). \quad (2.1)$$

Ou seja, $\psi_t(x)$ é tal que para todo $x \in \mathbb{R}^3$ e todo $t \geq 0$ vale

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x_3^2} \right) + V(x) \psi(t, x).$$

O aparecimento do número complexo i na equação acima poderia parecer neste momento meio misterioso, mas em um instante vai se mostrar bastante natural.

Acima $\hbar \sim 6.626069...10^{-34}$ é uma constante conhecida com a constante de Planck. Não é uma constante matemática. Esta constante é obtida para uma certa escolha de unidades de medida (*Joule.segundos*).

Por exemplo, se uma partícula de massa muito pequena estivesse sujeita a ação de um potencial V da forma $V(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 + x_2^2$, então a correspondente equação de Schrodinger seria tal que para todo $x = (x_1, x_2, x_3)$ e todo $t \geq 0$, temos que

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x_3^2} \right) + (x_1^2 + x_2^2) \psi(t, x).$$

Qualquer $\psi(t, x)$ que resolva a equação acima vai descrever uma possível evolução temporal desta partícula. Vários exemplos interessantes são calculados explicitamente em [119], [76] e [33].

Um estudo detalhado desta equação aparece em [29] e [212].

A condição inicial seria dada por uma certa densidade inicialmente fixada $\psi_{t_0} \in \mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$ que tem sua norma neste espaço de Hilbert igual a 1, ou seja, tal que $|\psi_{t_0}| = 1$. A densidade $|\psi_{t_0}(x)|^2$ descreve a estatística da posição espacial x da partícula no tempo inicial t_0 . Para simplificar vamos supor que $t_0 = 0$. A evolução de ψ_t , ao longo do tempo $t \geq 0$, ficará determinada de forma única a partir desta ψ_0 inicial.

Um ponto importante a destacar é que quando consideramos a densidade acima, não estamos falando de um feixe de partículas, mas a descrição de uma única partícula cujo comportamento a princípio ignoramos, mas que será descrita por esta função.

No caso em que x é unidimensional a equação de Schrödinger seria dada por

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x^2} + V(x) \psi(t, x).$$

Assim, fixada uma condição inicial $\psi_0 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ em $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(\mathbb{R})(dx)$, então a probabilidade de encontrar a partícula no tempo t no intervalo $[a, b]$ seria dada por $\int_a^b |\psi_t(x)|^2 dx$, onde $\psi_t(x)$ satisfaz a equação acima. Na figura 2.1 o valor da área achuriada descreve esta probabilidade.

Não vamos falar neste texto de questões que envolvem conjuntamente a Teoria da Relatividade. Isto é necessário apenas quando se trabalha com partículas que tem altíssima velocidade. Por exemplo, o entendimento do comportamento dos eletrons emitidos pelos filamentos incandescentes dentro de um tubo catódico não requer uma descrição nos moldes da Mecânica Quântica Relativística. A teoria a ser descrita aqui basta, em princípio, para a sua compreensão.

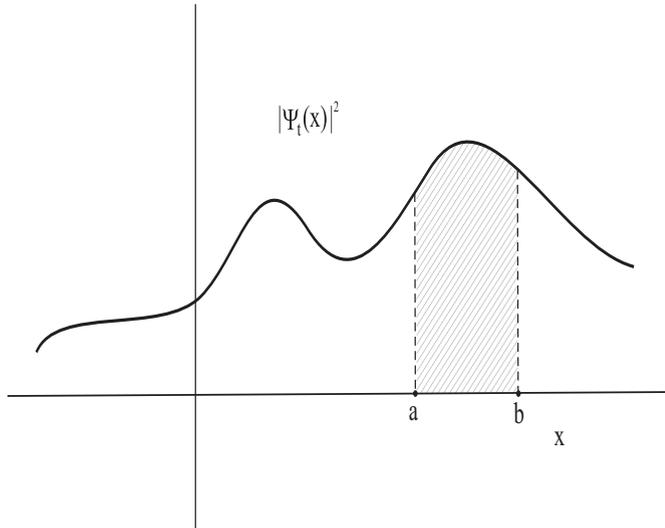


Figura 2.1:

Note que, aparentemente, nada se afirma sobre o momento p na equação acima (este apareceu na equação clássica de Hamilton). O momento inicial também será descrito por uma outra função densidade, via um elemento em $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^3)(dp)$, onde dp é a medida de Lebesgue em \mathbb{R}^3 . Na verdade, uma vez fixada a distribuição da posição x , dada pela condição inicial ψ_{t_0} , esta nova distribuição espacial do momento $p \in \mathbb{R}^3$ ficará determinada de maneira única a partir de ψ_{t_0} como veremos em breve.

Na Mecânica Quântica vamos associar ao Hamiltoniano inicialmente considerado $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, um operador \mathbf{H} agindo em

certas funções ψ em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$, de tal forma que $\mathbf{H}(\psi) = \phi$, onde ϕ é dado para todo $x = (x_1, x_2, x_3)$ por

$$\begin{aligned} \phi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x \psi(x) + V(x)\psi(x) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x_3^2} \right) + V(x)\psi(x). \end{aligned}$$

A associação de $H(x, p)$ com o Operador Hamiltoniano

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \mathcal{V} = \frac{\mathcal{P}^2}{2m} + \mathcal{V}$$

é chamado de quantização do sistema clássico definido pelo Hamiltoniano H .

Note que, em primeiro lugar, uma ψ em $\mathcal{L}_C^2(\mathbb{R}^3)(dx)$ não necessariamente é duas vezes diferenciável. No entanto, o conjunto das funções de classe C^2 é denso em $\mathcal{L}_C^2(\mathbb{R}^3)(dx)$, e, para uma ψ geral a ação do operador \mathbf{H} vai ser descrito por uma procedimento limite (na norma do espaço de Hilbert $\mathcal{L}_C^2(\mathbb{R}^3)(dx)$) a partir da expressão acima (que formalmente só faz sentido para uma função duas vezes diferenciável). Este processo envolve muitas technicalidades e no momento só vamos ressaltar que vale esta propriedade.

Observe também que na ausência de potencial o operador \mathbf{H} é basicamente menos o operador Laplaciano. Neste caso vamos denotar tal \mathbf{H} por \mathbf{H}_0 . O sistema clássico associado considera partículas livres que andam em linha reta, ou seja, seguindo geodésicas para a métrica Euclidiana. Vamos voltar a analisar este caso no cenário quântico mais tarde.

De forma sintética a equação de Schrödinger afirma que para a desejada ψ_t vale a expressão

$$\mathbf{H}(\psi) = i\hbar \psi', \quad (2.2)$$

ou seja, para todo $t \geq 0$ e todo x , a $\psi(t, x)$ satisfaz

$$\frac{d\psi}{dt} = \psi'(t) = \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H}(\psi(t)) = \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \mathcal{V} \right) (\psi(t)), \quad (2.3)$$

onde $\psi(0) = \psi_0 \in \mathbb{L}_{\mathbb{C}}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$, $\psi_0 : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$, foi fixada como condição inicial.

Referimos o leitor a [51] para resultados gerais envolvendo a equação de Schrodinger. Notas históricas sobre o desenvolvimento da Mecânica Quântica aparecem em [72].

Vamos agora considerar um exemplo: seja $\mathcal{V} = \frac{1}{2} m \mathcal{X}^2$, então neste caso,

$$\mathbf{H} = \frac{\mathcal{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \mathcal{X}^2.$$

Neste caso estamos quantizando o Hamiltoniano clássico $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m x^2$ que descreve o oscilador harmônico.

Lembre que para qualquer constante α

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} e^{i\alpha t} &= \frac{d}{dt} (\cos(\alpha t) + i \sin(\alpha t)) = \alpha (-\sin(\alpha t) + i \cos(\alpha t)) = \\ &\alpha i (\cos(\alpha t) + i \sin(\alpha t)) = i\alpha e^{i\alpha t}. \end{aligned}$$

Ora,

$$\psi(t, x) = \left(\frac{m}{\pi \hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m x^2}{2\hbar}} e^{-i \frac{1}{2} t} = \left(\frac{m}{\pi \hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m x^2}{2\hbar}} \left(\cos\left(-\frac{1}{2} t\right) + i \sin\left(-\frac{1}{2} t\right)\right)$$

é tal que $\frac{d}{dt} \psi(t, x) = \left(\frac{m}{\pi \hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m x^2}{2\hbar}} \left(-i \frac{1}{2}\right) e^{-i \frac{1}{2} t}$.

Note que

$$\frac{d}{dx} \frac{d}{dx} \psi(t, x) = \left(\frac{m}{\pi \hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m x^2}{2\hbar}} e^{-i \frac{1}{2} t} \left[-\frac{m}{\hbar} + \frac{m^2 x^2}{\hbar^2}\right].$$

Vamos agora calcular $\frac{1}{\hbar i} \mathbf{H}(\psi)$, que resulta em

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(t, x)\right) + \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{2} m x^2 \psi(t, x) &= \\ \left(\frac{m}{\pi \hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m x^2}{2\hbar}} \left(-i \frac{1}{2}\right) e^{-i \frac{1}{2} t}. \end{aligned}$$

Observamos então que vale a equação $\frac{1}{\hbar i} \mathbf{H} \psi(t, x) = \frac{d}{dt} \psi(t, x)$.

Assim, concluímos que neste caso $\psi(t, x) = \left(\frac{m}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m x^2}{2\hbar}} e^{-i\frac{1}{2}t}$ é solução da equação de Schrödinger para $\mathcal{V} = \frac{m}{2} \mathcal{X}^2$. Tal evolução temporal $\psi_t, t \geq 0$, corresponde a condição inicial $\psi(0, x) = \left(\frac{m}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m x^2}{2\hbar}}$.

A densidade da distribuição de probabilidade da posição x da partícula no tempo $t \geq 0$ é dada por $|\psi(t, x)|^2 = \left(\frac{m}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m x^2}{\hbar}}$ (que por acaso não depende de t).

Retornando ao caso geral, afirmamos que a solução que descreve a posição espacial da partícula será então descrita por uma curva $\psi(t) = \psi_t$ parametrizada por $t \geq 0$ no espaço de Hilbert $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$. Na verdade a evolução ao longo do tempo deveria estar sempre na esfera unitária de $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$, ou seja, $B(1) = \{\psi \in \mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(\mathbb{R}^3)(dx), \text{ tal que } |\psi| = 1\}$. Isto de fato ocorre pela própria estrutura da equação de Schrödinger como vamos ver a seguir.

A equação acima, se não fosse pelo termo $\frac{1}{i\hbar}$, lembraria a equação da difusão.

A solução $\psi_t = \psi(t)$ que satisfaz $\psi' = \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H}(\psi)$, e a condição inicial ψ_0 no tempo $t = 0$, pode ser descrita, em princípio, de forma simples [241] para $t \geq 0$ através de

$$\psi(t) = e^{t \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H}}(\psi_0).$$

Note que

$$e^{t \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H}}(\psi_0) = e^{-t i \frac{1}{\hbar} \mathbf{H}}(\psi_0).$$

A função de onda no tempo $t \geq 0$, obtida através da ação do exponencial do Hamiltoniano \mathbf{H} , denominada ψ_t , é determinada pela condição inicial ψ_0 . A expressão $|\psi_t(x)|^2$ vai descrever no tempo t a probabilidade de encontrar a partícula em uma certa região A através do valor $\int_A |\psi_t(x)|^2 dx$.

O valor médio da posição da partícula no tempo t seria

$$\int x |\psi_t(x)|^2 dx.$$

Note que como \mathbf{H} é auto-adjunto então o operador de evolução temporal $e^{-t \frac{1}{\hbar} \mathbf{H}}$, $t \geq 0$, é tal que para cada t fixo ele é unitário. Desta forma, como $\langle \psi_0, \psi_0 \rangle = 1$ e \mathbf{H} é autoadjunto, então vale que $\langle e^{\frac{-i}{\hbar} \mathbf{H}t} \psi_0, e^{\frac{-i}{\hbar} \mathbf{H}t} \psi_0 \rangle = 1$. Assim, para todo $t \geq 0$ temos que $|\psi_t|^2$ descreve a densidade de uma probabilidade em \mathbb{R}^3 .

Após o explicado acima, acreditamos que ficou mais claro agora o papel do i na equação de Schrödinger $\mathbf{H}(\psi) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$. De forma explícita: se \mathbf{H} fosse limitado, então para todo x e $t \geq 0$ temos que

$$\psi_t(x) = e^{\frac{-it}{\hbar} \mathbf{H}} \psi_0(x) = \sum_0^{\infty} \frac{1}{n!} \left[\left(\frac{-i\mathbf{H}t}{\hbar} \right)^n \psi_0 \right](x).$$

Em geral o operador \mathbf{H} que devemos considerar aqui não é limitado, e, é necessário expressar o que dissemos acima de outra forma (ver seção 2.20 de [189]), mas, entendemos que, neste momento, nossa liberdade poética é justificável por razões didáticas.

Considere um sistema com massa muito pequena que se encontra no regime quântico. Suponha que o potencial clássico associado fosse $V(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 + 7x_2^3$. Seu Hamiltoniano quantizado associado seria o operador autoadjunto $\mathbf{H} = \frac{\mathcal{P}^2}{2m} + \mathcal{X}_1^2 + 7\mathcal{X}_2^3 = \frac{1}{2m} \mathcal{P} \circ \mathcal{P} + \mathcal{X}_1 \circ \mathcal{X}_1 + 7\mathcal{X}_2 \circ \mathcal{X}_2 \circ \mathcal{X}_2$.

Fixada uma condição inicial ψ_0 , a sua evolução temporal $t \geq 0$, é dada por

$$\psi_t = e^{\frac{-it}{\hbar} (\frac{\mathcal{P}^2}{2m} + \mathcal{X}_1^2 + 7\mathcal{X}_2^3)} \psi_0.$$

Se o potencial fosse $V(x_1, x_2, x_3) = x_1 x_3$ teríamos de enfrentar o problema de escolher entre o Hamiltoniano $\frac{\mathcal{P}^2}{2m} + \mathcal{X}_1 \mathcal{X}_3$ e $\frac{\mathcal{P}^2}{2m} + \mathcal{X}_3 \mathcal{X}_1$. Lembre que em geral os operadores podem não comutar. Questões como estas são o objeto da próxima seção. No presente caso não haveria problema pois é fácil ver que $\mathcal{X}_3 \mathcal{X}_1 = \mathcal{X}_1 \mathcal{X}_3$. Na próxima seção vamos abordar questões relacionadas a este assunto.

Observamos que se ψ_t satisfaz a equação de Schrödinger, então $\overline{\psi_t}$ satisfaz a equação de Schrödinger com tempo invertido

$$\mathbf{H}(\overline{\psi}) = -i\hbar \frac{\partial \overline{\psi}}{\partial t}.$$

É importante separar aquelas propriedades básicas que provêm do fenômeno físico (observadas, direta ou indiretamente, na natureza através de experimentos) daquelas que podem ser deduzidas matematicamente destas.

Vamos enunciar ao longo do texto sete postulados (que devem ser entendidos como as propriedades "Matemáticas" que devemos assumir a partir da "Física" do problema) que irão aparecer na medida da sua conveniência.

Destacamos aqui o fato que não existe consenso entre os físicos sobre um conjunto mínimo e consistente de postulados para a Mecânica Quântica. Alguns destes Postulados não são sujeitos a comprovação através de experimentos. Eles apenas estabelecem as fundações de uma teoria cujas consequências tem sido comprovadas em sua maior parte através de diversos experimentos realizados ao longo de várias décadas. O sentido da palavra Postulado no presente texto é apenas aquele de enunciar uma afirmação que não é derivável matematicamente, mas que é necessário assumir para que o modelo matemático a ser estabelecido descreva o fenômeno físico observado (através de experiências). A formulação matemática precisa capturar estas peculiaridades.

O autor gostaria de esclarecer que os postulados apresentados aqui podem nem mesmo ser um conjunto minimal de postulados. Por exemplo, como se pode comprovar no texto [189], alguns postulados formulados no presente texto poderão ser deduzidos de um postulado mais fundamental (enunciado por exemplo via o Teorema Espectral).

Nosso objetivo é tão somente permitir o entendimento da formulação matemática dos fenômenos descritos pela Mecânica Quântica. Uma certa intuição do que acontece no fenômeno físico é sem dúvida muito útil e importante. Mas, este não é o foco principal do presente texto.

POSTULADO 1. *Suponha que uma certa partícula (que é regida pelas Leis da Mecânica Quântica) é descrita no tempo $t = 0$ pela densidade $|\psi_0(x)|^2$, onde $1 = |\psi_0| = \sqrt{\int_M |\psi_0(x)|^2 dx}$.*

Então existe uma família ψ_t indexada por $t \geq 0$, com $|\psi_t| = 1$, denominada estado (ou função de onda) no tempo t , $\psi_t : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$, tal que probabilidade de encontrar a partícula num conjunto $C \subset \mathbb{R}^3$ no tempo t é dada por

$$\int_C |\psi_t(x)|^2 dx = \int_C |\psi(t, x)|^2 dx.$$

Se a partícula esta sob a ação de um potencial V (independente de t), então $\psi(t, x)$ satisfaz a equação de Schrödinger correspondente (2.1) com a condição inicial ψ_0 .

Note que $\psi(t, x)$ e $\psi(t, x)e^{ic(t, x)}$ descrevem a mesma probabilidade (quando para um t fixo tomamos o módulo ao quadrado $|\psi(x)|^2$). Se para um dado t vale que $\psi_t(x) = ae^{ic}$ dizemos que c é a fase associada e a a amplitude da onda. Como veremos em breve a fase desempenha um papel fundamental na interferencia entre distintos estados.

Podemos considerar em um certo tipo de problema que, inicialmente, no tempo 0, a partícula estava colocada num certo ponto $x_0 \in \mathbb{R}^3$. Desta forma a condição inicial na equação de Schrödinger seria $\psi_0 = \delta_{x_0}$, ou seja, a delta Dirac em x_0 (uma idealização matemática que definimos precisamente na seção 13). A condição inicial não seria mais um elemento em $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$ mas sim uma distribuição, ou, também chamada de função generalizada (na seção 13 vamos elaborar sobre este conceito). A δ_{x_0} representa um "densidade" que não possui dispersão.

Desta forma a evolução temporal seria dada por ψ_t , $t > 0$, que satisfaz no sentido de distribuição

$$\psi'(t) = \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H}(\psi(t)), \quad \psi(0) = \delta_{x_0}.$$

Neste caso, a densidade probabilistica do momento p no tempo 0, ficaria sem sentido como veremos. Este fato está associado ao Princípio da Incerteza.

Na verdade na Mecânica Quântica uma "partícula" localizada no ponto x_0 é descrita, mais precisamente, pelo que se vai chamar de pacote de ondas (vamos preferir, em geral, considerar um caso particular, que é o assim chamado pacote Gaussiano centrado em x_0), este sim, um elemento em $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$, e que será apresentado na seção 8. A esta "partícula" vamos poder associar o conceito de posição "média" e momento "médio". Este estado possui certas particularidades notáveis. Observamos que o conceito de velocidade vai aparecer mais tarde no texto (mas de uma forma um pouco distinta do esperado).

O leitor pode encarar a questão da interpretação do sentido da densidade do estado da seguinte forma: se colocarmos a partícula no ponto x_0 , várias vezes seguidas sob a ação do mesmo sistema descrito por \mathbf{H} , ela poderá evoluir ao longo do tempo de distintas maneiras. Assim, num tempo fixado t não poderemos dizer de forma determinística onde ela está. Mas se colocarmos, digamos, mil vezes a partícula na mesma posição x_0 , e a seguir observarmos a sua posição no tempo t , o número de vezes n_t que ela está em $(a_1, b_1) \times (a_2, b_2) \times (a_3, b_3)$ será tal que aproximadamente

$$\frac{n_t}{1000} \sim \int_{(a_1, b_1) \times (a_2, b_2) \times (a_3, b_3)} |\psi_t(x)|^2 dx.$$

Na Mecânica Quântica, de forma completamente diferente da Mecânica Clássica, não vai se determinar o comportamento individual de uma partícula, mas sim, a estatística do conjunto de soluções.

Em experiências em laboratório se consegue liberar através de um aparelho uma partícula por vez. A maneira como o aparelho está preparado determina o estado (digamos ψ). Se liberamos várias vezes a partícula sob a ação do mesmo aparelho, a estatística da sua colisão com um objeto fixado (uma placa sensível), será descrita pela densidade $|\psi(x)|^2$.

A necessidade da descrição probabilística da posição da partícula segue da nossa ignorância "determinística" (para tentar prever o seu comportamento). No entanto, a teoria afirma que não existe ignorância "estatística".

A estrutura conceitual da Mecânica Quântica é intrinsecamente aleatória. Átomos radioativos, mesmo que preparados da mesma forma em laboratório, decaem aleatoriamente no tempo precisamente de acordo com as previsões probabilísticas da Mecânica Quântica ([13]).

Um dos primeiros experimentos em laboratório onde foram obtidos resultados que estão em concordância com a Teoria da Mecânica Quântica foi o experimento de Stern–Gerlach. Uma sintética exposição do assunto pode ser encontrada na seção 5.13 de [11].

Seria natural pensar que, numa certa determinada vez em que colocamos a partícula em uma posição x_0 , a sua evolução temporal

seria descrita por um caminho contínuo em \mathbb{R}^3 . Algo semelhante a uma trajetória amostral de um movimento Browniano. Afirmamos que do ponto de vista da Física esta concepção não está correta. Fixado um tempo t , se faz uma medição da partícula neste instante, e, ela tem uma certa estatística. Isto é tudo.

Quando a condição inicial ψ_0 não é δ_{x_0} , mas sim uma função em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$, então estaremos analisando um caso em que a própria posição inicial da partícula não é determinística. Ou seja, ela tem uma certa distribuição de posição inicial descrita pela densidade $|\psi_0(x)|^2$, onde $1 = |\psi_0| = \sqrt{\int_M |\psi_0(x)|^2 dx}$.

O formalismo acima se estende de forma natural a $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^n)(dx)$. Este elemento $\psi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ é o que chamamos uma função de onda em \mathbb{R}^n , ou, um estado em \mathbb{R}^n . Dizemos que está normalizada se ψ tem norma neste espaço de Hilbert igual a 1.

Um dos objetivos das próximas seções é esclarecer o que corresponde na Mecânica Quântica à posição $x = (x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ (que usualmente se considera na Mecânica Clássica). O operador \mathcal{X}_j , $j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$, vai desempenhar o papel da coordenada x_j da posição x da partícula clássica.

Vamos analisar também em breve o que corresponde na Mecânica Quântica ao momento $p = (p_1, p_2, p_3, \dots, p_n)$ da Mecânica Clássica. O operador \mathcal{P}_j , $j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$, onde $\mathcal{P}_j(\psi) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_j}$ vai desempenhar o papel da coordenada p_j do momento clássico p .

Definição 2.2. É usual chamar $U(t) = e^{-ti \frac{1}{\hbar} \mathbf{H}}$ de propagador, ou, operador de evolução, associado ao gerador infinitesimal $-i \frac{1}{\hbar} \mathbf{H}$.

É fácil ver que $U(t)$ satisfaz a propriedade de semigrupo (ver seção 4.3 in [14]): dados $s, t \geq 0$, temos que

$$U(t)U(s) = U(t+s).$$

Dados dois estados ϕ e φ (com norma igual a 1) é natural na Mecânica Quântica entender que $\langle \phi, \varphi \rangle$ é um número complexo mas seu módulo $|\langle \phi, \varphi \rangle|$ descreve num certo sentido o quanto um é similar ao outro. Se eles são ortogonais $|\langle \phi, \varphi \rangle| = 0$, mas, se por acaso eles são iguais $|\langle \phi, \varphi \rangle| = 1$. Se $|\langle \phi, \varphi \rangle|$ é

próximo de 1 dizemos que os estados ϕ e φ são coerentes. Ainda, se $|\langle \phi, \varphi \rangle|$ é próximo de 0 dizemos que eles não são coerentes (ou, que são descoerentes). Um fenômeno bastante investigado é o estudo de diversos processos que levam a que dois estados ϕ, φ que eram inicialmente coerentes se tornam descoerentes. Por exemplo, em certos casos ϕ e φ são coerentes mas, eventualmente, a evolução dinâmica de φ , segundo o Hamiltoniano \mathbf{H} , faz com que $e^{-t i \frac{1}{\hbar} \mathbf{H}}(\varphi)$ e ϕ se tornem mais e mais descoerentes a medida que $t \rightarrow \infty$. Referimos o leitor a [63] onde um certo caso é tratado e relacionado com o Teorema Ergódico Quântico de Von Neumann (ver [278] e [193]).

Destacamos aqui o fato que a equação de Schrödinger (que é uma equação diferencial parcial de segunda ordem linear) conduz de maneira natural a um estudo de autovalores e autovetores de \mathbf{H} . De fato, suponha que $\psi(t, x)$ que é uma solução de

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(t, x) = \mathbf{H}\psi(t, x),$$

seja escrita, via separação de variáveis, como $\psi(t, x) = c(t)\psi(x)$.

Obtemos assim, substituindo a expressão na equação de Schrödinger, e, a seguir, derivando em t

$$i\hbar c'(t)\psi(x) = c(t)\mathbf{H}(\psi)(x).$$

Logo existe uma constante λ tal que

$$\lambda = \frac{i\hbar c'(t)}{c(t)} = \frac{\mathbf{H}(\psi)(x)}{\psi(x)}.$$

Desta forma obtemos que $c(t) = e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda t}$, para to $t \geq 0$, e, ainda que $\mathbf{H}(\psi) = \lambda\psi$, para todo x .

Assim, tal $\psi(t, x) = e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda t} \psi(x)$, onde ψ é autovetor de \mathbf{H} associado ao autovalor λ , descreve uma classe "especial" de soluções da equação de Schrödinger com condição inicial ψ .

Se ψ_0 não é autofunção de \mathbf{H} , de qualquer forma, $\psi_t = e^{\frac{-t i}{\hbar} \mathbf{H}} \psi_0$ descreve a evolução temporal do estado inicial ψ_0 ao longo do tempo $t \geq 0$.

Um estudo matematicamente aprofundado e rigoroso da equação $\mathbf{H}(\psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \mathcal{V}(\psi) = \lambda\psi$ é apresentado ao final de [176] (ver também [51]).

O conjunto dos autovalores λ de \mathbf{H} , e mais geralmente o espectro deste operador, desempenha um papel muito importante na Teoria (ver seção 11 em [176] para um estudo detalhado do espectro deste operador). Referimos o leitor a seção 9.4 em [39] para o cálculo de autovalores e autofunções em diferentes exemplos.

Vamos mostrar mais tarde na seção 2.1 de [189] que (sob certas hipóteses) o conjunto dos valores do espectro do operador autoadjunto \mathbf{H} está contido na imagem do Hamiltoniano clássico $H(q, p)$ associado. Em particular os pontos de espectro pontual e contínuo de \mathbf{H} são sempre reais (ver seção 2.1 de [189]).

Note que o operador Hamiltoniano $\mathcal{P}^2\psi = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}\psi$ (o caso em que $V = 0$ e $m = 1$), agindo em $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2([0, 2\pi])(dx)$, é tal que para cada n natural, vale que $\psi(x) = e^{inx}$ é autofunção em $\mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2([0, 2\pi])(dx)$ associada ao autovalor $\hbar^2 n^2$. A função $\cos(nx)$ também é autofunção associada ao autovalor $\hbar^2 n^2$.

Definição 2.3. Um estado inicial ψ é dito estacionário para \mathbf{H} se $U(t)(\psi) = \psi_t$, é tal que para todo $t \geq 0$, e, para todo x , vale

$$|\psi(x)|^2 = |\psi_t(x)|^2.$$

Ou seja, se ψ_t determina a mesma densidade que ψ para todo $t \geq 0$.

Por exemplo, se $\mathcal{V} = \frac{m}{2} \mathcal{X}^2$, sabemos que

$$\psi(t, x) = \left(\frac{m}{\pi \hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m x^2}{2\hbar}} e^{-i \frac{1}{2} t}$$

satisfaz a equação de Schrödinger. Note que neste caso

$$\psi(0, x) = \left(\frac{m}{\pi \hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m x^2}{2\hbar}}$$

define um estado inicial estacionário.

Note que $|\psi(0, x)|^2 = \left(\frac{m}{\pi \hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{\frac{\hbar}{m}}}$ determina uma distribuição de probabilidade Gaussiana fixa que tem média zero e variância $\frac{\hbar}{2m}$. Observe que se a massa m for grande então a variância será pequena.

Voltando ao caso geral quando $\mathbf{H}(\varphi_n) = \lambda_n \varphi_n$, $n \in \mathbb{N}$, note que para n fixo, independente de t , temos que $\psi_t = e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_n t} \varphi_n$ determina a mesma distribuição de probabilidade que φ_n . Ou seja, como caso particular, as funções $|\psi_{3.1}(x)|^2 = |\psi_{7.2}(x)|^2$ definem a mesma densidade de probabilidade. Concluimos assim que para n fixo, se $\mathbf{H}(\varphi_n) = \lambda_n \varphi_n$, então φ_n define um estado inicial estacionário para a evolução temporal da equação de Schrödinger.

Sendo assim, dado \mathbf{H} , para encontrar estados estacionários, devemos então buscar $\psi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ e $\lambda \in \mathbb{R}$ tais que $\mathbf{H}(\psi) = \lambda \psi$

Suponha que \mathbf{H} seja da forma

$$\mathbf{H} = \sum_n \lambda_n P_{\varphi_n},$$

onde os φ_n (de norma 1) formam um conjunto completo enumerável (note que nem sempre isto ocorre) e os λ_n são reais. Por convenção sempre indexamos os autovalores em ordem crescente

$$\lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n < \dots$$

Estes autovalores vão corresponder a níveis de energia do Hamiltoniano quântico. Ou seja, no presente caso, a medição da energia de um estado só poderá dar como resultado um destes autovalores do operador Hamiltoniano \mathbf{H} . Isto será mais bem explicado na seção 1.3. No caso do operador \mathbf{H} ter espectro contínuo a situação é mais complexa e uma medição vai resultar num elemento do espectro de \mathbf{H} (detalhes na seção 2.1 de [189]).

Sendo assim, obtemos a forma geral da função de onda

$$\psi(t, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_n t} \varphi_n(x),$$

onde φ_n é o autovetor associado a λ_n e $\alpha_n \in \mathbb{C}$. A condição inicial $\psi_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \varphi_n$, determina os valores α_n , $n \in \mathbb{N}$.

Assim, $\psi_t(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_n t} \varphi_n(x)$, $t \geq 0$, fica determinado (sabemos quem são os α_n , $n \in \mathbb{N}$, a partir da expansão do estado inicial ψ_0).

Observe que estamos assumindo neste momento que \mathcal{V} é tal que qualquer elemento no espaço de Hilbert possa ser expresso como uma soma $\sum \alpha_n \varphi_n$.

Uma expressão mais geral - como a descrita acima - não é estacionária.

Note que $\psi(t, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n e^{-\frac{i}{\hbar} \lambda_n t} \varphi_n(x)$ está normalizada. Isto porque para todo t temos $|\psi_t| = \sqrt{\sum_{n=0}^{\infty} |\alpha_n|^2}$.

Desta forma para qualquer t vale que

$$\int |\psi_t(x)|^2 dx = 1.$$

Se o Hamiltoniano \mathbf{H} definido acima esta agindo no toro de dimensão n , ou, em uma variedade diferenciável compacta M , então, de fato, pode-se mostrar que (sob condições razoáveis sobre V) existe um conjunto orthonormal completo de autofunções.

Note que estamos sendo um pouco imprecisos aqui. O estado dado por $\sum \alpha_n e^{-\frac{i}{\hbar} \lambda_n t} \varphi_n$ poderia ser um elemento em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$ que não tem norma 1. É usual falar do estado definido por um genérico ϕ como aquela obtido a partir de $\frac{1}{|\phi|} \phi$, ou seja, após ser normalizado. Isto será feito no texto em várias situações sem ser mencionado.

Um dos resultados importantes que mostraremos mais tarde (seção 2.1 de [189]) é o seguinte:

Teorema 2.1. Seja $V(x)$ uma função contínua em \mathbb{R}^d satisfazendo $V(x) \geq 0$, e $V(x) \rightarrow \infty$ com $|x| \rightarrow \infty$. Então

1. $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \mathcal{V}$ é auto-adjunto
2. $\sigma(\mathbf{H})$ consiste de autovalores isolados $\{\lambda_n\}_{n=0}^{\infty}$, com $\lambda_n \rightarrow \infty$, quando $n \rightarrow \infty$.

Ou seja, \mathbf{H} é da forma

$$\mathbf{H} = \sum_n \lambda_n P_{\varphi_n},$$

onde os φ_n formam um conjunto orthonormal completo enumerável.

Este Teorema permite exibir uma grande classe de exemplos em que o espectro é constituído apenas por autovalores e estes são em quantidade enumerável. Isto acontece por exemplo para o oscilador harmónico.

Os autovalores λ_n , $n \in \mathbb{N}$, descrevem os possíveis valores de energia deste Hamiltoniano que podem ser obtidos via medição (ver seção 3). A palavra "Quanta" tem o sentido de quantidades discretas. Neste caso os λ_n , $n \in \mathbb{N}$, seriam os possíveis níveis de energia λ_n **que poderiam resultar de uma medição** (conforme seção 3). Medições são feitas através de aparelhos em laboratórios. Por exemplo, se pode medir a energia de uma partícula quântica.

O Hamiltoniano $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{x^2}{2}$, que corresponde a $V(x) = \frac{x^2}{2}$, se enquadra nas hipóteses do último Teorema acima. Conforme veremos na seção 1.6 os autovalores do correspondente operador quantizado $\mathbf{H} = \frac{\mathcal{P}^2}{2m} + \frac{\mathcal{X}^2}{2}$ são $\lambda_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \frac{1}{\sqrt{m}}$, $n = 0, 1, 2, \dots, n, \dots$, e assim apenas estes valores podem surgir de medição da energia de um estado. Note que $\lambda_{n+1} - \lambda_n = \hbar \frac{1}{\sqrt{m}}$.

Observamos que a medida que a massa m cresce o espaçamento entre os níveis de energia diminui. Neste sentido o limite semiclássico seria considerar $m \rightarrow \infty$ e desta forma o espaçamento tenderia a zero. Isto faz muito sentido em função do fato que na Mecânica Clássica (em princípio o limite da Mecânica Quântica quando a massa é muito grande) existe um contínuo de possíveis níveis de energia.

Definição 2.4. Caso exista o menor autovalor, a autofunção associada a este autovalor é denominada de "ground state" (ou, estado fundamental).

As outras autofunções - estados - são consideradas mais excitadas.

No cenário clássico os valores da energia varrem um contínuo de possibilidades, ou seja, os valores de $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$. Note que estes valores estão sempre acima do mínimo de V . No caso do Teorema acima os valores de energia seriam os possíveis autovalores λ_n (contido nos valores da imagem de H como veremos).

Dado um potencial $V : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ de classe C^∞ e o correspondente \mathbf{H} suponha que λ seja um autovalor e $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ a associada autofunção. Isto é para todo x

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = \lambda\varphi(x).$$

Assim,

$$\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = (V(x) - \lambda)\varphi(x).$$

Pode-se mostrar que tal φ é C^∞ . Resultados análogos são também verdadeiros no setting em que $V : S^1 \rightarrow \mathbb{R}$ é de classe C^∞ , ou seja, é verdade que $\varphi : S^1 \rightarrow \mathbb{R}$ é C^∞ .

Se existir um ponto x onde $\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = 0$, então a menos que $\varphi(x) = 0$ teremos que λ está na imagem de $V : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Desta forma, neste caso, os valores da energia estão dentro da imagem de V . Assim, valores de V e autovalores do operador de Schrödinger estão relacionados. Este fato será descrito de forma mais elaborada e com muitos detalhes na seção 2.2 de [189].

No setting em que $V : S^1 \rightarrow \mathbb{R}$, como φ é diferenciável e periódica vão existir pontos onde φ' é nula. Haverão também pontos onde $\varphi'' = 0$.

Dado um potencial $V : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ periódico, ou seja ($V(a) = V(b)$), e de classe C^∞ , então existe um conjunto ortonormal completo de autofunções periódicas $\varphi_n : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, $n \in \mathbb{N}$ para o operador \mathbf{H} . Uma maneira de se obter isto é a seguinte: o operador \mathbf{H} tem inverso compacto \mathbf{G} e assim se pode utilizar aqui o Teorema Espectral para o operador compacto \mathbf{G} a fim de indiretamente obter o conjunto orthonormal enumerável completo $\varphi_n, n \in \mathbb{N}$ (e correspondentes autovalores λ_n para o operador Hamiltoniano \mathbf{H} (ver seção 8.3 e Theorem 2.105 pagina 204 em [82] ou [64]).

O espectro de \mathbf{H} quando V periódico é analisado por exemplo na seção 1.4.1 em [175].

Neste caso os autovalores de \mathbf{H} podem assumir valores que não estão entre o máximo e o mínimo de V .

O conjunto enumerável dos autovalores β_n do operador compacto \mathbf{G} se acumula em zero quando $n \rightarrow \infty$. Desta forma existe um número infinito de autovalores $\lambda_n = \frac{1}{\beta_n}$ para \mathbf{H} e eles convergem a

infinito. Este problema é tratado via função de Green no Corolário 2 página 116 do Cap. IV em [141]. Observamos que em [141] as condições de fronteira para as autofunções $\varphi_n : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ são gerais (por exemplo da forma $\varphi_n(a) = 0 = \varphi_n(b)$) mas não exatamente periódicas da forma $\varphi_n(a) = \varphi_n(b)$. De qualquer forma os mesmos princípios gerais podem ser aplicados no caso periódico. Em [201] na expressão (1.3.2) da seção 1.3 as condições periódicas de fronteira são contempladas como caso particular.

O mesmo ocorre para o operador Hamiltoniano \mathbf{H} correspondente a $V : M \rightarrow \mathbb{R}$ quando M é variedade Riemanniana compacta (sem bordo).

Estas questões unidimensionais estão relacionadas ao Problema de Sturm Liouville (num intervalo $[a, b]$) e são descritas com muitos detalhes em [141] e também por J. Bellissard na seção 1.5 página 555 de [286]. Por exemplo, as autofunções tomam valores reais (ver 2.5 na página 102 de [141]) e os autovalores formam um conjunto enumerável (ver 2.6 página 103 e Cor. 4 página 117 em [141]). Referimos também o leitor a [64] para outros detalhes sobre estas considerações.

A autofunção φ_0 associada ao menor autovalor λ_0 do operador \mathbf{H} (ver seção 11.5 em [176]) satisfaz é claro a equação

$$\mathbf{H}(\varphi_0) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta(\varphi_0) + \mathcal{V}(\varphi_0) = \lambda_0 \varphi_0.$$

Assim, $\varphi_t = e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_0 t} \varphi_0$ descreve a evolução desta condição inicial que é estacionária.

Denote por φ_0^m a solução para cada m distinto de $\mathbf{H}(\varphi_0^m) = [-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \mathcal{V}](\varphi_0^m) = \lambda_0 \varphi_0^m$

No caso unidimensional a autofunção associada ao menor autovalor é única e estritamente positiva. No item 3) da seção 1.6 onde apresentamos vários exemplos o caso específico de potencial V periódico e as autofunções de \mathbf{H} será analisado com mais detalhe. O leitor interessado em mais detalhes pode encontrá-los na proposition 2.9 chapter 8 in [269] ou em [176].

Questões interessantes que relacionam a possível descoberta de um certo Hamiltoniano especial (tal que seus autovalores satisfaçam

certas propriedades determinadas) e a Hipótese de Riemman aparecem em [30], [54] and [26]

Note que para obter a densidade da posição do estado ψ_t , t fixo, nos basta $|\psi_t|^2$. O papel e a necessidade de se tratar o estado ψ_t , t fixo, como uma função que toma valores complexos, no entanto, está associado ao seu caráter de onda e sua suscetibilidade à interferência. Vamos elaborar sobre isto.

Suponha que

$$\mathbf{H} = \sum_n \lambda_n P_{\varphi_n}.$$

Se por acaso o estado inicial fosse $\psi_0 = a_2\varphi_2 + a_7\varphi_7$, então,

$$\psi_t = a_2 e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_2 t} \varphi_2 + a_7 e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_7 t} \varphi_7$$

vai definir a distribuição de probabilidade em x , via $|\phi_t(x)|^2$, que vai variar dependendo de t . Assim, não seria um estado estacionário.

Suponha ainda que t está fixo, e, que seja possível construir um aparato de tal forma que a partícula sob a ação do Hamiltoniano \mathbf{H} selecione no tempo t um estado fixo (com norma 1), digamos, $e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_2 t} \varphi_2$. Então, a densidade na variável x observada seria dada por

$$|\varphi_2(x)|^2.$$

Suponha que t está fixo, e, que agora construimos um novo aparato, similar ao anterior, mas de tal forma que a partícula sob a ação do Hamiltoniano \mathbf{H} selecione o estado (com norma 1) $e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_7 t} \varphi_7$. Então, a densidade na variável x observada seria dada por

$$|\varphi_7(x)|^2.$$

Um fato surpreendente na Mecânica Quântica é que as distintas possibilidades de probabilidade se interferem entre si! **Esta interferência poderia se dar de muitas formas distintas, mas a que realmente ocorre na Natureza é aquela que é a mais natural em termos da estrutura subjacente de espaço vetorial.** Mais exatamente, suponha que contruíssemos um terceiro aparato que se utiliza dos outros dois anteriores, que não privilegia em excesso nenhum dos dois, mas que permite a seleção de partículas sob as duas situações.

Pode ocorrer uma combinação do dois estados. Obteríamos assim um estado mixto. Suponha que $a_2, a_7 \in \mathbb{C}$ são tais que a função resultante tenha norma em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ igual a 1, ou seja, que

$$|a_2 e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_2 t} \varphi_2 + a_7 e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_7 t} \varphi_7| = 1.$$

Ao se fazer uma medição deste novo estado, a densidade em x observada no tempo t no fenômeno físico em consideração, é dada por

$$| [a_2 e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_2 t} \varphi_2(x)] + [a_7 e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_7 t} \varphi_7(x)] |^2 \quad (*).$$

O caráter da soma

$$[a_2 e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_2 t} \varphi_2(x)] + [a_7 e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_7 t} \varphi_7(x)] \quad (**),$$

é exatamente como aquela obtida através da soma de duas funções de ondas,

$$[a_2 e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_2 t} \varphi_2(x)] \text{ e } [a_7 e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_7 t} \varphi_7(x)] \quad (***),$$

que se superpõem. Note como podem ser distintos os possíveis valores da norma da soma ao variarmos apenas t . Se num certo tempo t e num certo ponto x as parcelas estivessem positivamente alinhadas, por exemplo,

$$[a_2 e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_2 t} \varphi_2(x)] = 5 e^{-0.3i},$$

e

$$[a_7 e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_7 t} \varphi_7(x)] = 8 e^{-0.3i}$$

a soma das parcelas seria máxima. Desta forma a probabilidade de encontrar a partícula perto deste ponto x no tempo t seria grande.

Se, por outro lado, no tempo t e neste mesmo ponto x as parcelas não estivessem alinhadas, por exemplo, uma igual a $5 e^{-0.3i}$ e a outra igual a $8 e^{(-0.3+\pi)i}$, então a soma seria bem menor.

Uma expressão do tipo (*) e que é oriunda de (**) determina muitas vezes um distribuição com muitas pequenas oscilações (grande variação da derivada). Isto ocorre mesmo que $|\varphi_2(x)|^2$ e $|\varphi_7(x)|^2$ não possuam muitas oscilações. Uma descrição geométrica do que estamos dizendo: imagine que na figura 2.3 temos que (a) descreve o gráfico de $|a_2 \varphi_2(x)|^2$ e (b) descreve o gráfico de $|a_7 \varphi_7(x)|^2$. Então

poderia eventualmente ocorrer em uma dada situação que (d) descreve "aproximadamente" o gráfico de (*).

Observe que sob as condições acima quando se fizer uma medição da energia vamos obter ou λ_2 ou λ_7 . Quando se faz uma medição existe um colapso da indeterminação (oriunda da prévia aleatoriedade entre os possíveis eventos λ_2 ou λ_7) e se obtém apenas uma das duas possibilidades. Ao se fazer uma nova medição nas mesmas condições do aparato experimental se poderia obter de novo a mesma energia ou então a outra.

Em resumo: as distintas probabilidades individuais (em separado) se interferem quando consideramos o coletivo delas. Esta interferência se dá de uma forma análoga à interferência de ondas num meio líquido. Note que a probabilidade é uma função matemática e não é um objeto de natureza física como, por exemplo, uma onda eletromagnética. A introdução da estrutura complexa na questão em análise é que permite neste momento expressar esta interferência de forma matematicamente simples e elegante.

Para ilustrar o problema em consideração no mundo real, apresentaremos o seguinte experimento: de um lado, temos uma fonte emissora S de partículas (elétrons, por exemplo). Cada partícula deve passar por um anteparo, que possui duas fendas, e atingir um detector D no outro lado (figura 2.2). Faremos a medição **da posição da partícula quântica ao colidir com o detector** sempre no mesmo tempo t após cada partícula ser emitida no tempo $t = 0$. Desta forma repetindo o experimento várias vezes podemos obter uma distribuição de probabilidade da posição destas colisões (sempre no mesmo tempo t após ser emitida a partícula). Referimos o leitor para a seção 1.1 em [153] para uma formulação mais precisa em termos do fenômeno físico em consideração.

Se fecharmos a fenda 2 e liberando várias partículas podemos calcular a distribuição de probabilidade $P_1(x)$ de o detector ser acionado por um elétron que passou pela fenda 1 conforme figura 2.3 (a) e colidiu no ponto $x \in D$ no tempo t . A variável x descreve a posição na placa detectora. Se ψ_t descreve o estado da partícula (sob tais condições) no tempo t então $|\psi_t(x)|^2 = P_1(x)$.

Num outro experimento - liberando várias partículas - podemos fechar a fenda 1 conforme figura 2.3 (b)) e calcular a distribuição de probabilidade $P_2(x)$ de o detector ser acionado por um elétron que passou pela fenda 2.

Vamos agora realizar **outro experimento** em que deixamos as duas fendas abertas e - liberando várias partículas - fazendo várias medições teremos que algumas partículas irão passar pela fenda 1 e outras pela fenda 2. Nesta situação faremos uma estatística das várias colisões na placa determinado a probabilidade de que o choque ocorreu em algum lugar da placa detectora.

Pareceria natural que a média as duas distribuições anteriores nos forneceria a probabilidade de o detector ser acionado por um elétron que passou pela fenda 1 ou pela fenda 2 (ver figura 2.3 (c)) e colidiu no ponto x em D . De outra forma: do ponto de vista clássico a probabilidade de que uma partícula atinja o detector no tempo t é

$$P(x) = \frac{1}{2} (P_1(x) + P_2(x))$$

onde P_1 e P_2 são respectivamente as probabilidades de a partícula atingir o detector passando pela fenda 1 ou 2, respectivamente.

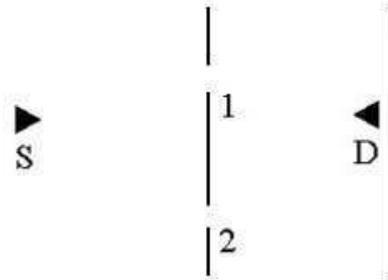


Figura 2.2: S é a fonte de elétrons e D é um detector para as partículas emitidas.

A distribuição de probabilidade (pensando classicamente) deveria ser uma curva gerada pela superposição das probabilidades via fenda

1 e 2 (ver figura 2.3). Mas não é isto que acontece no experimento. Os dados das medições físicas nos mostram que não resulta uma densidade de probabilidade da forma 2.3 (c) mas sim de acordo com 2.3 d).

No caso das duas fendas abertas, a distribuição que descreve as partículas que colidem no ponto genérico x do detector no tempo t terá - a partir dos dados reais coletados - o aspecto aproximado de uma senóide com amplitude decrescente à medida que nos aproximamos dos extremos do anteparo (figura 2.3 (d)). Desta forma, obtemos os padrões de interferência entre possíveis caminhos alternativos. Observa-se uma difração na distribuição probabilística dos dados o que revela o caráter ondulatório de partículas como elétrons (para mais detalhes sobre os dados experimentais ver [285]). Para uma interessante discussão sobre o fenômeno da tripla fenda recomendamos o leitor a [258].

As distribuições de probabilidade (objetos matemáticos) individualizadas (ou seja, P_1 e P_2) se interferem quando colocadas em conjunto. Este experimento ilustra em termos físicos o que descrevemos antes: o caráter oscilatório da distribuição da dupla fenda está em consonância com expressões do tipo (*) (**) e (***). Em termos matemáticos a estrutura de espaço vetorial (soma de números complexos) captura a essência de como corre a interferência.

Na Mecânica Quântica, os modelos não são observados sem que causemos nele algum tipo de interferência. Ainda, o fato de observar simultaneamente dois eventos pode resultar em algo bem mais complexo que examinar cada caso em separado.

Note o fato intrigante que a simples existência da possibilidade da observação por duas fendas altera, instantaneamente, o comportamento estatístico da partícula a ser emitida.

Uma discussão sobre o interferômetro de Ramsey e o fenômeno de interferência aparece na seção 6.2 em [8].

A terminologia estados coerentes está associada a descrição do fato que estados quânticos se interferem. A medida que se considera massas maiores num determinado sistema acontece o fenômeno denominado decoerência que significa que as interferências começam a ficar mais fracas. Outros fenômenos também podem produzir decoerência e isto é muito importante na Teoria da Informação Quântica. Na dissertação [144] é apresentada uma discussão interessante sobre

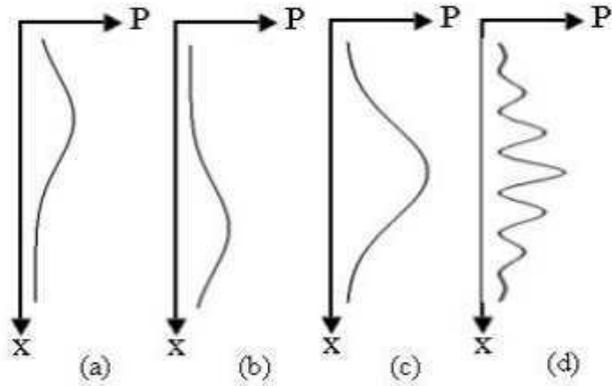


Figura 2.3: (a) $P_1(x)$. (b) $P_2(x)$. (c) $P_1(x) + P_2(x)$ (previsão clássica). (d) A distribuição que é realmente observada no caso da dupla fenda.

este tópico.

Na medida em que o sistema descrito por $H(x, p)$ é considerado com uma massa maior e maior, e se as distâncias forem muito grandes (e ainda uma certa proporção entre elas) nos afastamos mais e mais da Mecânica Quântica (ver [205], [249] e [5]). Observa-se no fenômeno físico que diminui mais e mais a volatilidade da partícula. Este tópico está descrito aqui nas seções que consideram o chamado limite semiclássico que, num certo sentido, significa assumir que a massa e as distâncias envolvidas estão ficando maiores e maiores (chegando ao nível dos objetos macroscópicos). Observamos aqui que na verdade esta questão envolve uma análise mais complexa do que supor apenas isto. Este tópico será abordado na seção 2.14 de [189]. Nestas considerações estamos supondo sempre que está mantida a forma do Hamiltoniano, ou seja, o potencial V não muda.

No trabalho [156] o autor destaca e explica porque quando se toma na "Mecânica Quântica" o limite em \hbar indo a zero (questão rodeada de polêmica científica) não se determina o mundo da "Mecânica Clássica". Referimos o leitor para [202], [133], [69], [97], [177], [110] e [284] para considerações e resultados matematicamente interessantes

sobre o assim chamado limite semiclássico da Mecânica Quântica. No texto vamos tocar neste tópico em alguns momentos (por exemplo, antes da definição 1.28).

Um pouco antes da definição 1.4 mostramos um exemplo onde ao tomar o limite da massa $m \rightarrow \infty$ obtemos um resultado que faz sentido do ponto de vista clássico. Note que neste caso este limite semiclássico irá considerar apenas estados estacionários.

Em [263] o autor (que é um matemático expert no assunto de limite semiclássico) explica que no caso de um elétron a equação

$$i \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t}(t, x) = -\frac{\epsilon^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x^2} + V(x) \psi(t, x)$$

é aquela obtida reescalando todos os parâmetros físicos da equação de Schrodinger (massa, carga do elétron, constante de Planck, etc.). Este ϵ é uma constante "dimensionless", ou seja, uma constante matemática sem atributos de grandezas como metros, segundos, etc... Assim, o comportamento clássico "deveria" emergir quando ϵ vai a zero assumindo a premissa básica que a Mecânica Clássica descreve sistemas que possuem escalas de energia-tempo muito maiores que \hbar .

Mais precisamente, para t fixo, a distribuição de probabilidade de $|\psi_t(x)|^2$ - onde ψ_t satisfaz a equação de Schrodinger acima com ϵ variável - deveria descrever, de alguma forma, quando $\epsilon \rightarrow 0$, um sistema mecânico clássico.

Mas uma análise completa da questão, segundo o autor, ainda não está totalmente contemplada em termos matemáticos (ver [98] para maiores detalhes).

Para um certo tempo fixado t , a probabilidade espacial ψ_t vai descrever no limite semiclássico um comportamento coletivo de soluções [15]. Estamos sendo um pouco ambíguo aqui porque na equação de Hamilton se necessita fixar uma posição e um momento inicial, mas isto pode ser corretamente equacionado de outra forma (via pacote de ondas Gaussiano). Observamos que só quando a massa cresce e fica a nível macroscópico, que volta a ter sentido o conceito de velocidade (como a conhecemos na Mecânica Clássica).

Observação: No caso de um potencial V periódico a análise do limite semiclássico quando $m \rightarrow \infty$ afirma que a probabilidade descrita pela densidade $|\varphi_0^m|^2(x)dx$ vai se concentrar nos mínimos do

potencial V . Esta afirmação está matematicamente fundamentada em vários casos e referimos o leitor a [135] [253] [254], [105], [154], [155], [108] e [138] para a prova destes resultados. Observe que do ponto de vista físico faz sentido que o limite do estado quântico de mínima energia, quando $m \rightarrow \infty$, vá determinar soluções no menor nível de energia para o Hamiltoniano clássico. Observamos que embora em [138] (e em outras das referências acima mencionadas) os autores falem em $\hbar \rightarrow 0$, ou $\epsilon \rightarrow 0$, o resultado também pode ser lá enunciado alternativamente como $m \rightarrow \infty$.

Considere fixado um Hamiltoniano

$$H(x, p) = \frac{|p|^2}{2m} + V(x),$$

mas de massa m variável. Quando a massa é pequena o caráter ondulatório do estado se faz presente, no entanto, quando consideramos uma massa maior e maior, nos aproximamos da Mecânica Clássica, onde não se percebe a manifestação de tal fenômeno. A decoerência é (aproximadamente) total. Como se interpreta a passagem de uma teoria a outra? Mais tarde quando tratarmos do limite semiclássico vamos abordar tal questão. Na verdade, vai ser o método da fase estacionária [210] que vai dar a justificativa matemática a tal fato. Quando a massa fica grande as oscilações ficam muito intensas e se cancelam conforme seção 2.14 de [189]. Mas então vamos necessitar assumir certas hipóteses sobre em qual sentido estamos fazendo isto.

Na Mecânica Clássica a adição de uma constante V_0 ao potencial não altera as equações de Hamilton, e, assim o mesmo acontece com a evolução temporal do sistema.

Na Mecânica Quântica por sua vez a adição de uma constante ao potencial clássico, e sua consequente quantização, leva ao aparecimento (multiplicativo) de uma fase da forma $e^{\frac{i}{\hbar} V_0 t}$ na função de onda ψ_t . Ou seja, $\psi_t, t \geq 0$, muda. Naturalmente, isto não causa alteração nas probabilidades de encontrar a partícula em um dada região.

Note também que a adição de uma constante V_0 ao potencial clássico, e sua consequente quantização, não altera o conjunto das

autofunções do operador Hamiltoniano associado, mas, os correspondentes autovalores são trasladados por V_0 .

Copmo já observamos antes que $\psi(x) = a(x)e^{i c(x)}$ e $\phi(x) = a(x)e^{i b(x)}$, onde $a(x) > 0$ e $b(x), c(x)$ são números reais, descrevem a mesma distribuição de probabilidade da partícula porque para todo x vale $|\psi(x)|^2 = a(x)^2 = |\phi(x)|^2$.

Segundo alguns autores, no entanto, o $c(x)$ (que descreve uma fase na onda ψ) tem relevância do ponto de medição probabilística e isto está relacionado com o que se chama de Berry phase. Não vamos elaborar sobre isto (ver [37]).

A teoria descrita nesta seção pode ser estendida em sua maior parte a Hamiltonianos que possuem um potencial que depende do tempo, ou seja, da forma $H(x, p, t) = \frac{p^2}{2m} + V(x, t)$. Para simplificar o desenvolvimento da teoria vamos considerar no texto apenas Hamiltonianos autônomos.

A título de ilustração, informamos que no site

<http://www.instructioneducation.info/inhaltquant.html>

é possível encontrar uma sintética exposição da Mecânica Quântica acompanhada de alguns programas de computador que permitem ao leitor perceber através de figuras e simulações algumas das propriedades básicas que serão descritas de forma teórica aqui.

Exposições matematicamente rigorosas e bem mais sofisticadas do que a descrita no presente texto podem ser encontradas em [289], [72], [287], [12], [126] ou [227].

No interessante artigo "Gap Labelling Theorems for Schrödinger operators" de J. Bellissard em [286], ao lado de diversas considerações históricas, o autor discute na seção 1.3 página 548 a questão de considerar operadores limitados ou não no setting de C^* -Algebras. Neste trabalho também é discutida a questão: é natural considerar os problemas de Mecânica Quântica no setting de Geometria não Comutativa (ver seção 2) ? Em [189] o ponto de vista de C^* -Algebras (em Mecânica Quântica e Mecânica Estatística Quântica) é discutido com algum detalhe.

Um tópico mais avançado é por exemplo a relação da Mecânica Quântica com spectral triplets (uma boa exposição pode ser encontrada por exemplo em [164] e [275]).

Em [72] o autor descreve com detalhes e de forma rigorosa alguns

modelos importantes do ponto de vista da Física como os relacionados com o átomo de Hidrogênio, Potenciais Coulomb, átomos de Hélio, etc... Estes tópicos são também tratados com rigor em [12] e [117].

Questões que envolvem as desigualdades de Bell e hidden variables permitem mostrar que não se pode tratar as questões da Mecânica Quântica com o formalismo clássico da Teoria dos Processo Estocásticos. Uma bela exposição ao mesmo tempo curta e simples de tais tópicos aparece em [11] na seção 5.2.2 (ver também [12]).

Para uma descrição geral de distintas formalizações da Mecânica Quântica referimos o leitor a [63].

Em [95] são apresentados vários exemplos interessantes que podem ser ilustrados e, eventualmente, melhor entendidos via simulação em computador usando o software Mathematica.

Capítulo 3

O Comutador na Mecânica Quântica

Os observáveis clássicos são funções e os observáveis quânticos serão operadores autoadjuntos. O produto de funções (que é comutativo) será substituído no cenário quântico pela composição de operadores.

Vamos analisar algumas propriedades básicas da composição de alguns dos operadores que desempenham um papel fundamental na teoria.

Definição 3.1. O comutador de dois operadores A e B é definido como

$$[A, B] = AB - BA.$$

Assim, se A e B comutam o seu comutador é o operador zero. Note que para qualquer operador A vale $[A, A] = 0$.

Uma motivação para estudar tal questão é saber, por exemplo, se $\mathcal{X}_1 \mathcal{P}_2 = \mathcal{P}_2 \mathcal{X}_1$.

Vamos mostrar no Teorema 4.2 que se dois operadores comutam então eles são simultaneamente diagonalizáveis (usando um mesmo conjunto ortnormal completo).

Lema 3.1. *Dados os operadores A, B , e C , então:*

- 1) $[A, B] = -[B, A]$
- 2) $[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$.
- 3) $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$.

Demonstração:

Vamos demonstrar apenas 3).

Ora,

$$\begin{aligned}
 [A, [B, C]] &= [A, BC] - [A, CB] = \\
 &= B[A, C] + [A, B]C - C[A, B] - [A, C]B = \\
 B[A, C] - [A, C]B + [A, B]C - C[A, B] &= [B, [A, C]] + [[A, B], C] = \\
 &= -[B, [C, A]] - [C, [A, B]].
 \end{aligned}$$

■

Lema 3.2. *Para quaisquer $j, k \in \{1, 2, \dots, n\}$*

$$1) [\mathcal{X}_k, \mathcal{X}_j] = [\mathcal{P}_k, \mathcal{P}_j] = 0$$

e, ainda, para qualquer $j \in \{1, 2, \dots, n\}$

$$2) \frac{i}{\hbar} [\mathcal{P}_j, \mathcal{X}_j] = Id.$$

Finalmente, para $j \neq k \in \{1, 2, \dots, n\}$

$$3) \frac{i}{\hbar} [\mathcal{P}_j, \mathcal{X}_k] = 0.$$

Demonstração:

1) Para uma dada ψ temos

$$\begin{aligned}
 [\mathcal{X}_k, \mathcal{X}_j](\psi) &= [\mathcal{X}_k \mathcal{X}_j - \mathcal{X}_j \mathcal{X}_k](\psi) = \\
 x_k x_j \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) - x_j x_k \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) &= 0.
 \end{aligned}$$

Para uma dada ψ de classe C^2 temos

$$[\mathcal{P}_k, \mathcal{P}_j](\psi) = [\mathcal{P}_k \mathcal{P}_j - \mathcal{P}_j \mathcal{P}_k](\psi) =$$

$$\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_k \partial x_j} - \hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_j \partial x_k} = 0,$$

porque as derivadas parciais mistas comutam.

2) Para uma dada ψ temos

$$\begin{aligned} [\mathcal{P}_j, \mathcal{X}_j](\psi) &= [\mathcal{P}_j \mathcal{X}_j - \mathcal{X}_j \mathcal{P}_j](\psi) = \\ &= -i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial x_j} (x_j \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)) - x_j \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \right\} = \\ &= -i\hbar \left\{ x_j \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) + \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) - \right. \\ &\quad \left. x_j \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \right\} = \\ &= -i\hbar \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \end{aligned}$$

3) Suponha $k \neq j$. Para uma dada ψ temos

$$\begin{aligned} [\mathcal{P}_j, \mathcal{X}_k](\psi) &= [\mathcal{P}_j \mathcal{X}_k - \mathcal{X}_k \mathcal{P}_j](\psi) = \\ &= -i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial x_j} (x_k \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)) - x_k \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \right\} = \\ &= -i\hbar \left\{ x_k \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) - x_k \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \right\} = 0. \end{aligned}$$

■

O lema acima requer algum cuidado com os domínios dos operadores envolvidos, mas não vamos aqui entrar em detalhes técnicos.

Suponha que dois operadores autoadjuntos A e B comutem e que o estado tenha sido preparado em $\psi \in \mathcal{L}_{\mathbb{C}}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$. Então os dois observáveis A e B podem ser medidos para "certos estados" ψ simultaneamente com infinita precisão. Não é possível preparar o estado ψ num laboratório de tal

forma que se possa medir \mathcal{X}_2 e o momento \mathcal{P}_2 simultaneamente com infinita precisão. Isto porque $[\mathcal{X}_2, \mathcal{P}_2] \neq 0$. O sentido matematicamente exato do que estamos afirmando será explicado de forma mais apropriada na seção 8.

Se dois operadores autoadjuntos A e B satisfazem $[A, B] = 0$ então é porque as medições correspondentes tem independência - medições de um não alteram a estatística das medições do outro - (ver considerações interessantes na seção 5.12 de [11]).

Assim, não surpreende que $[\mathcal{X}_1, \mathcal{X}_2] = 0$. O fato que $[\mathcal{X}_2, \mathcal{P}_2] \neq 0$ faz sentido. De fato, classicamente $p_2(t) = m x_2'(t)$ se $p(t) = (p_1(t), p_2(t), p_3(t))$, e portanto a componente 2 da velocidade $x'(t) = (x_1'(t), x_2'(t), x_3'(t))$, ou seja x_2' , depende da posição x_2 .

Lema 3.3. *Para qualquer $j \in \{1, 2, \dots, n\}$, e, qualquer ψ*

$$\frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \mathcal{X}_j](\psi) = -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x_j} \psi = \frac{1}{m} \mathcal{P}_j(\psi).$$

Demonstração:

Note que para todo j temos que

$$\Delta(x_j \psi)(x) = x_j \Delta \psi(x) + 2\nabla_j \psi(x),$$

onde $\nabla_j \psi = \frac{\partial \psi}{\partial x_j}$.

Ora,

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(x_j \psi)(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta(x_j \psi)(x) + x_j V(x) \psi(x) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} [x_j \Delta \psi(x) + 2\nabla_j \psi(x)] + x_j V(x) \psi(x). \end{aligned}$$

Desta forma, para um dado ψ temos

$$\begin{aligned} [\mathbf{H}, \mathcal{X}_j](\psi)(x) &= (\mathbf{H}\mathcal{X}_j)(\psi)(x) - (\mathcal{X}_j \mathbf{H})(\psi)(x) = \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} [x_j \Delta \psi(x) + 2\nabla_j \psi(x)] + x_j V(x) \psi(x) \right] - \end{aligned}$$

$$x_j \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta(\psi)(x) + V(x) \psi(x) \right] = -\frac{\hbar^2}{m} \nabla_j \psi(x).$$

Portanto, $\frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \mathcal{X}_j] = -\frac{i\hbar}{m} \nabla_j = \frac{1}{m} \mathcal{P}_j$. ■

De forma similar se pode mostrar que:

Lema 3.4. *Para qualquer $j \in \{1, 2, \dots, n\}$, e, qualquer ψ*

$$\frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \mathcal{P}_j](\psi) = -\frac{\partial V}{\partial x_j} \psi.$$

Faremos agora um breve paralelo com o mundo da Mecânica Clássica. Considere o Hamiltoniano $H(x, p)$, a equação de Hamilton e suponha que $(x(t), p(t))$ descreva uma solução clássica.

Vamos mostrar que o comutador $[A, B]$ dos operadores A e B corresponde na Mecânica Clássica ao colchete de Poisson [184].

Definição 3.2. Se $f, g : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}$, definimos o seu colchete de Poisson

$$\{f, g\} = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial g}{\partial x_j} - \frac{\partial f}{\partial x_j} \frac{\partial g}{\partial p_j} \right),$$

onde, $f(x, p) = f(x_1, \dots, x_n, p_1, \dots, p_n)$, $g(x, p) = g(x_1, \dots, x_n, p_1, \dots, p_n)$.

Pode se mostrar ([184] Ex 5 seção 3.2) que para cada $k, j \in \{1, 2, \dots, n\}$ vale $\{p_k, p_j\} = \{x_k, x_j\} = 0$, $\{x_k, p_j\} = \delta_{kj}$.

Isto corresponde, na Mecânica Quântica, a $[\mathcal{X}_k, \mathcal{X}_j] = [\mathcal{P}_k, \mathcal{P}_j] = 0$, $\frac{i}{\hbar} [\mathcal{P}_j, \mathcal{X}_j] = Id$, e, ainda, para $j \neq k$, $\frac{i}{\hbar} [\mathcal{P}_j, \mathcal{X}_k] = 0$.

Se $H(x, p) : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é o Hamiltoniano no sistema clássico, então a dinâmica clássica pode ser descrita pelas equações de Hamilton

$$\dot{x}_k = \{H, x_k\}, \quad \dot{p}_k = \{H, p_k\}, \quad k \in \{1, 2, \dots, n\}.$$

De fato, por exemplo, para cada $k \in \{1, 2, \dots, n\}$

$$x'_k = \{H, x_k\} = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial x_k}{\partial x_j} - \frac{\partial H}{\partial x_j} \frac{\partial x_k}{\partial p_j} \right) = \frac{\partial H}{\partial p_k}.$$

A expressão $\frac{p_k}{m} = x'_k = \{H, x_k\}$ é semelhante a que foi obtida acima

$$\frac{1}{m} \mathcal{P}_k = \frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \mathcal{X}_k].$$

Ainda, $p'_k = \{H, p_k\} = -\frac{\partial V}{\partial x_k}$, corresponde a afirmação: para qualquer ψ

$$\frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \mathcal{P}_k](\psi) = -\frac{\partial V}{\partial x_k} \psi.$$

Desta forma se percebe que a quantização do colchete de Poisson corresponde ao comutador de operadores.

Note que os operadores $\frac{\mathcal{P}^2}{2m}$ e \mathcal{V} não comutam.

Desta forma, não se pode afirmar que $e^{\frac{\mathcal{P}^2}{2m} + \mathcal{V}} = e^{\frac{\mathcal{P}^2}{2m}} e^{\mathcal{V}}$.

Observe ainda que o operador $\frac{\mathcal{P}^2}{2m} + \mathcal{X}_2 \mathcal{P}_2$ não é autodjunto.

Referimos o leitor a [136] para algumas considerações interessantes relacionadas com os tópicos descritos acima.

Ao final da seção 2.16 de [189] vamos abordar a relação entre $\{.,.\}$ e $[.,.]$ no limite semi-clássico $\hbar \rightarrow 0$.

Capítulo 4

Observáveis, valor esperado e o operador momento

No caso de uma certa partícula ser descrita de forma probabilística por uma densidade $|\psi(x)|^2$, ou seja, a probabilidade de encontrá-la numa região A é dada por

$$\int_A |\psi(x)|^2 dx,$$

observamos que as regiões onde $|\psi(x)|^2$ é grande são aquelas que temos mais chance de encontrá-la. Mesmo assim, é claro que se for muito muito pequeno o volume de uma região B em que os valores $|\psi(x)|^2$ são grandes, a integral $\int_B |\psi(x)|^2 dx$ poderá ter valor pequeno, ou seja será pequena probabilidade de encontrar a partícula em B .

Na análise que de qualquer fenômeno de natureza aleatória é natural tentar descobrir o comportamento médio associado. Por exemplo, suponha que a posição espacial de uma partícula sob a ação da equação de Schrödinger seja descrita por (x_1, x_2, x_3) no tempo t via $\psi_t \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$.

Podemos estar interessados em saber o comportamento médio da

sua coordenada x_2 no tempo t . A expressão

$$\int x_2 \|\psi_t(x_1, x_2, x_3)\|^2 dx_1 dx_2 dx_3,$$

descreve de forma analítica esta informação.

Este valor será denominado posteriormente de valor esperado no tempo t da variável clássica x_2 para a densidade $\|\psi_t(x_1, x_2, x_3)\|^2$. Observe que

$$\int x_2 \|\psi_t(x_1, x_2, x_3)\|^2 dx_1 dx_2 dx_3 = \langle \mathcal{X}_2 \psi, \psi \rangle .$$

Se, por exemplo, o valor de $\|\psi_t(x_1, x_2, x_3)\|^2$ é muito grande perto do ponto $(4.3, 7.1, 2) \in \mathbb{R}^3$ em comparação com os outros pontos de \mathbb{R}^3 , ou seja a densidade está muito concentrada em $(4.3, 7.1, 2)$, então a integral acima vai ficar perto do valor 7.1.

Definição 4.1. Um operador autoadjunto A agindo no espaço de Hilbert \mathcal{H} será chamado de observável. Vamos denotar de valor médio (ou valor esperado) da partícula descrita por $\psi \in \mathcal{H}$ sob o observável A a expressão

$$E(A)_\psi = \langle A \rangle_\psi = \langle \psi, A \psi \rangle .$$

No caso geral, o observável A pode ter o espectro constituído por parte contínua e pontual (autovalores).

Como A é autoadjunto, este valor $\langle \psi, A \psi \rangle$ será sempre um número real como já vimos na primeira seção.

Note que o o valor esperado de um A geral está sempre atrelado a uma distribuição espacial oriunda do estado ψ fixado.

Por exemplo, se $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$, e, $A = \mathcal{X}_2$, então, para uma dada fixada ψ_t

$$\langle \mathcal{X}_2 \rangle_{\psi_t} = \langle \psi_t, \mathcal{X}_2(\psi_t) \rangle = \int x_2 \|\psi_t(x_1, x_2, x_3)\|^2 dx_1 dx_2 dx_3 .$$

Uma pergunta natural é: quais são as propriedades da função de variável t , dada por $\langle \mathcal{X}_2 \rangle_{\psi_t}$, que se pode obter a partir do fato que ψ_t satisfaz a equação de Schrodinger?

Na Mecânica Clássica os observáveis são funções $f(x, p)$. Por exemplo, podemos estar interessados na evolução da coordenada x_2 do sistema mecânico governado por um certo Hamiltoniano clássico $H(x, p)$. Neste caso, $f(x, p) = x_2$. Podemos estar eventualmente interessados na evolução da coordenada p_3 deste sistema clássico; assim, seria natural considerar $f(x, p) = p^3$. Se considerarmos o observável clássico $f(x, p) = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2$, então estaríamos observando o módulo ao quadrado do vetor momento. E assim, por diante. Mais exatamente, se

$$(x(t), p(t)) = (x_1(t), x_2(t), x_3(t), p_1(t), p_2(t), p_3(t))$$

satisfaz a equação de Hamilton com condição inicial $(x_0, p_0) \in \mathbb{R}^6$, então, por exemplo, se $f(x, p) = x_2$, teremos que $x_2(t)$, descreve ao longo do tempo a evolução dinâmica da segunda coordenada da partícula. Ainda, se $f(x, p) = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2$, então $p_1^2(t) + p_2^2(t) + p_3^2(t)$, descreve ao longo do tempo a evolução dinâmica do módulo ao quadrado do momento da partícula.

Na Mecânica Quântica vamos trabalhar com a densidade da probabilidade da posição espacial x (ou do momento) da partícula. Não será possível dizer de forma determinística que no tempo t a partícula estará num determinado ponto. Se a partícula no tempo t tem distribuição caracterizada por ψ_t então seu valor médio de momento \mathcal{P}_3 será descrito por

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{P}_3 \rangle_{\psi_t} &= \langle \psi_t, \mathcal{P}_3(\psi_t) \rangle = \\ &= \int \psi_t(x_1, x_2, x_3) \overline{\left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_3} \psi_t(x_1, x_2, x_3) \right]} dx_1 dx_2 dx_3. \end{aligned}$$

O valor acima será um número real. Destacamos aqui o fato que foi (de certa forma) inevitável, como vimos, o uso dos números complexos na formulação da equação de Schrödinger. Mas quando vamos calcular o valor esperado de um observável obtemos sempre números reais que é o que se esperaria. Ou seja, ao calcular médias voltamos ao "nosso bom mundo real". Num certo sentido, mais próximo, ao "nosso conhecido mundo clássico".

A introdução dos números complexos na teoria se deve principalmente a necessidade de se produzir uma apropriada e elegante

descrição do fenômeno da interferência (como foi descrito na seção 2). Na verdade, existem formulações que dispensam a estrutura complexa e os mesmos resultados são obtidos mas por outros princípios (ver seção 12 no presente texto e ainda 2.18 de [189]).

O oscilador harmônico corresponde ao Hamiltoniano $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m \omega^2 x^2}{2}$.

O correspondente operador \mathbf{H} será

$$\phi(x) \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + \phi(x) \frac{m \omega^2 x^2}{2}.$$

Os autovalores são os números da forma $\lambda_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$, $n = 0, 1, 2, \dots$

Vamos mostrar em breve que o ground state (associado ao autovalor $\lambda_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$) do oscilador harmônico será da forma $\phi_0 = A e^{-\frac{x^2}{\alpha}}$, onde $\alpha = \frac{2\hbar}{m\omega}$. Escolhemos a constante A de tal forma que $|\phi_0| = 1$

O valor esperado do Hamiltoniano \mathbf{H} em ϕ_0 é a energia total do estado ϕ_0 .

Assim, ϕ_0 sob a ação de tal Hamiltoniano tem energia total

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{\mathcal{P}^2}{2m} \right\rangle_{\phi_0} + \langle \mathcal{V} \rangle_{\phi_0} = \\ & -\frac{\hbar^2}{2m} A^2 \int e^{-\frac{x^2}{\alpha}} \frac{d^2}{dx^2} (e^{-\frac{x^2}{\alpha}}) dx + A^2 \int e^{-2\frac{x^2}{\alpha}} \frac{m \omega^2 x^2}{2} dx = \\ & \frac{\hbar^2}{2m\alpha} + \frac{m \omega^2 \alpha}{8} = \frac{1}{2} \hbar \omega. \end{aligned}$$

Se nosso objetivo fosse observar o momento ao quadrado de $\phi_0 = A e^{-\frac{x^2}{\alpha}}$, então os possíveis resultados (ver Postulado 2 a seguir) poderiam atingir qualquer número não negativo (o espectro de \mathcal{P}^2 é a reta real não negativa). O valor médio das observações seria

$$\langle \mathcal{P}^2 \rangle_{\phi_0} = \frac{\hbar^2}{\alpha}.$$

Como vimos antes, o espectro do operador \mathcal{X}_j , $j \in \{1, 2, \dots, n\}$ contém toda a reta real. \mathcal{X}_j não possui autovalores.

Assim o operador autoadjunto \mathcal{X}_j não possui um conjunto ortonormal completo enumerável de autofunções.

Em qualquer caso, mesmo que o espectro não seja apenas pontual, o espectro do operador \mathbf{H} vai desempenhar um papel muito importante na Mecânica Quântica.

No caso unidimensional, se o observável for \mathcal{X} , então estaremos analisando a posição espacial do estado.

A álgebra dos observáveis deve ser encarada como uma versão não comutativa da álgebra das funções. A função real $x \rightarrow x_3^2$ vai corresponder a \mathcal{X}_3^2 , as funções reais aos operadores autoadjuntos, o Hamiltoniano clássico H a \mathbf{H} , etc...

Uma questão fundamental na teoria é o que se pode obter de uma medição física de um sistema quântico. O próximo postulado trata disto.

POSTULADO 2. *Os observáveis em Mecânica Quântica são descritos por operadores autoadjuntos A . Uma medição do observável A sobre um estado ψ vai dar como resultado um autovalor, ou mais geralmente, um elemento do espectro de A .*

Suponha que medição seja descrita por $A = \sum_n \lambda_n P_{\varphi_n}$, onde os φ_n formam um conjunto ortonormal enumerável completo, e, os autovalores correspondentes são denotados $\lambda_n \in \mathbb{R}$. Neste caso o espectro é constituído pelo conjunto dos autovalores. Assuma que o estado ψ seja descrito por $\psi = \sum \beta_k \varphi_k$, $\beta_k \in \mathbb{C}$. Preparando o aparelho que fará a observação da mesma forma e em se fazendo várias medições a frequência do aparecimento um determinado autovalor λ_k é descrita pela probabilidade $|\beta_k|^2$.

A palavra medição acima tem um sentido de algo que é medido por uma aparato físico. Não é uma terminologia matemática.

Por exemplo se A for o Hamiltoniano \mathbf{H} , então este observável, ao ser medido sobre uma partícula que está no estado ψ , vai resultar em algum autovalor de \mathbf{H} , o que vai corresponder a um certo nível de energia. Existem diversos aparelhos que em laboratórios de pesquisa conseguem medir a energia de um certo estado. Se repetirmos a medição, sob as mesmas condições, poderá ocorrer um outro resultado

(que será talvez um outro autovalor de \mathbf{H}). No exemplo do oscilador harmônico apenas os valores $\lambda_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$, $n = 0, 1, 2, \dots$, podem resultar de uma medição de energia. Neste caso apenas um conjunto enumerável de autovalores λ_n poderiam resultar da medição. Fixado o estado ψ e o observável A então a corrença de cada λ_n tem uma certa probabilidade (ver observação 1 abaixo).

Se repetirmos várias vezes estas medições o valor médio delas será $E(\mathbf{H})_\psi = \langle \psi, \mathbf{H}(\psi) \rangle$ (vamos elaborar sobre isto em seguida na observação 1).

Como dissemos antes vamos mostrar na seção 2 que os conjunto dos valores do espectro do operador autoadjunto \mathbf{H} está contido na imagem do Hamiltoniano clássico $H(q, p)$ associado. Assim, o postulado acima não é assim tão surpreendente.

Note que o observável posição \mathcal{X} (caso unidimensional por exemplo) não possui autovalores. Uma versão mais ampla do postulado acima afirma que apenas valores do espectro podem ser obtidos como fruto de uma medição (ver seção 2.1 e 2.2 de [189], vamos elaborar um pouco mais sobre este ponto). Neste caso, como qualquer número real está no espectro, temos que uma medição quântica da posição pode eventualmente atingir qualquer número real. Note que no experimento da fenda dupla (que mencionamos anteriormente) os valores atingidos na placa detectora (medição de posição x) podem estar em qualquer lugar (qualquer ponto da reta real associada ao detector).

Quando a partícula num tempo t colide no ponto x com a placa detectora conforme descrito no exemplo da figura 2.2, em função do seu impacto, se pode "medir" a sua energia (autovalor do Hamiltoniano \mathbf{H}). Os possíveis valores assim obtidos (sob certas hipóteses) estariam apenas entre um certo conjunto enumerável de possibilidades (os autovalores do observável \mathbf{H}).

Ao passar um foton por um cristal, este ao sair, determina um estado que é uma combinação de dois estados cada um com um spin. Isto não caracteriza a ação de um operador autoadjunto. Após esta passagem, se pode medir a sua colisão com uma placa e aí teremos uma medição (que será descrito por operador autoadjunto).

A ação de um operador unitário sobre um estado resulta como output um outro estado. Sendo assim não descreve uma medição.

Vamos descrever de outra forma o valor $\langle A \rangle_\psi$ para uma certa ψ em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$. Suponha que para o operador autoadjunto A , definido num espaço de Hilbert \mathcal{H} , vale o seguinte: existem autovetores φ_n , $n \in \mathbb{N}$, de multiplicidade finita, com autovalores $\lambda_n \in \mathbb{R}$, que definem um conjunto ortonormal enumerável completo. Em geral sempre se ordena os autovalores em ordem crescente

$$\lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n \leq \dots$$

Ora, ψ pode ser escrito como $\psi = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \varphi_n$.

Assim,

$$\begin{aligned} \langle \psi, A(\psi) \rangle &= \left\langle \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \varphi_n, A\left(\sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \varphi_n\right) \right\rangle = \\ &= \left\langle \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \varphi_n, \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \lambda_n \varphi_n \right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n \alpha_n \overline{\alpha_n} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n |\alpha_n|^2. \end{aligned}$$

Se $|\psi| = 1$, então vale

$$1 = \left\langle \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \varphi_n, \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \varphi_k \right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \overline{\alpha_n} = \sum_{n=0}^{\infty} |\alpha_n|^2.$$

Observação 1: a expressão acima deve ser entendida da seguinte forma. Fixado ψ , cada valor $|\alpha_n|^2$, $n \in \mathbb{N}$, descreve a probabilidade de que a partícula descrita pelo estado ψ (com densidade de probabilidade $|\psi(x)|^2$), sob a ação do observável A , e após uma medição, resulte no valor real λ_n . Esta afirmação complementa o postulado acima e será explicitado no Postulado 5. Mais detalhes e considerações sobre este ponto aparecem após o Postulado 8 na seção 2.1 de [189]. Podemos considerar então que é inerente ao problema a existência de uma medida de probabilidade P com pesos $|\alpha_n|^2$, $n \in \mathbb{N}$. Desta forma podemos descrever o valor esperado do autovalor através da expressão $\sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n |\alpha_n|^2$. Este sentido de valor esperado descrito agora é, em princípio, conceitualmente diferente do anteriormente introduzido $\langle \psi, A(\psi) \rangle$. Resulta ao fim serem os mesmos valores.

Note que como $\sum_{n=0}^{\infty} |\alpha_n|^2 < \infty$, os valores $|\alpha_n|^2$ tendem a zero quando $n \rightarrow \infty$. Assim, os níveis correspondentes aos autovalores maiores tem a tendencia de terem menor probabilidade.

Estamos afirmando (no presente caso) que os únicos possíveis resultados da observação A seriam os autovalores λ_n . Esta afirmação requer um explicação mais cuidadosa do seu sentido preciso, e, será objeto do Postulado 4, e, das considerações subseqüentes ao Postulado 6 (seção 2.1 de [189]).

Observe que quando é feita uma medição existe um colapso da indeterminação (oriunda esta da prévia aleatoriedade descrita pelo estado) e a medição resulta num dos possíveis autovalores do operador observável em consideração. O aparato que faz a medição no laboratório pode ser descrito de forma matemática via um certo operador autoadjunto L . O colapso do estado é um postulado que não é governado pela equação de Schrodinger.

Uma questão interessante é perguntar o que se pode dizer do "sistema quântico" (que ao ser observado colapsa num autovalor digamos) "antes" de uma medição. Referimos o leitor a [24] para a descrição de certos experimentos feitos em laboratório que tentam entender o mencionado problema.

É importante destacar a diferença entre modelar matematicamente a realidade e a realidade física em si mesma. Se L é um observável (um operador autoadjunto) e ψ um estado, não existe uma interpretação física direta para $L(\psi)$. Por exemplo, não existe sentido físico para $-\Delta\psi$. Observe entretanto que $\langle \psi, L(\psi) \rangle$ nos dá o valor esperado; ainda, que os autovalores de L determinam os possíveis eventos obtidos via medição. Embora um certo operador autoadjunto L (observável) fixado permita entender o que se pode prever no mundo real, não é qualquer expressão matemática inerente ao modelo que possui uma corresponsente interpretação física.

No entanto, faz sentido do ponto de vista da realidade física aplicar um operador unitário a um estado ψ e o resultado é um outro estado ϕ .

Existem outros operadores cujo input é um estado ψ e cujo output é outro estado ϕ e que tem relevância física. Por exemplo, certas experincias em laboratório são descritas por um operador projeção P_φ

onde está fixado um estado φ . Um operador projeção não é unitário (não é inversível).

Como dissemos antes a palavra "quanta" tem o sentido de quantidade discreta. Na Mecânica Clássica uma função (observável) pode assumir um contínuo de possíveis valores. Na Mecânica Quântica, por sua vez, um observável A (que satisfaz a hipótese acima, ou seja, seu espectro é constituído apenas por um conjunto enumerável de autovalores), medido para uma partícula no estado ψ , só poderá apresentar um certo conjunto enumerável de resultados (seus autovalores λ_n).

Observação 2: de forma heurística, podemos dizer que a medida que a massa m do sistema em consideração cresce temos que o espaçamento entre os autovalores (a energia) do Hamiltoniano diminui, de tal forma que quando a massa fica "grande" temos a ilusão de que todos os valores reais são possíveis para a energia (num contínuo de possibilidades do observável clássico). A formalização matemática rigorosa de tal afirmação (no entendimento do autor) não está ainda no momento disponível. No entanto, na seção de exemplos (no caso do oscilador harmonico) vamos mostrar que esta afirmação faz todo sentido.

Num átomo existem possíveis níveis de energia para os eletrons em torno do núcleo. Estes seriam descritos pelos autovalores de um certo $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \mathcal{V}$. Se uma partícula tem um certo nível de energia determinada, digamos λ_2 , então, sua densidade de posição espacial será dada pela correspondente densidade $|\varphi_2(x)|^2$.

Inicialmente se pode pensar que o eletron estaria no estado de nível de energia mais baixo, ou seja, com energia λ_0 , e, descrito pela densidade de posição $|\varphi_0(x)|^2$. Este é denominado de ground state.

Se fornecermos energia ao sistema ele poderá saltar a um nível de energia mais alto, digamos λ_1 , e assim seria descrito pela densidade de posição $|\varphi_1(x)|^2$.

Estamos assim colocando o estado num numa certa particular escolha. Existem outras maneiras de se preparar o sistema num laboratório para se obter um determinado estado ψ .

Considere fixado em operador Hamiltoniano \mathbf{H} que será encarado como um observável. Uma dada partícula quântica (um estado) pode

exibir um comportamento misto: ter um pouco de energia λ_1 e um pouco de energia λ_3 , mas suponha que apenas estes. Assim, a ψ que descreve tal partícula teria a forma $\psi = \alpha_1 \varphi_1 + \alpha_3 \varphi_3$, onde φ_1 e φ_3 designam as autofunções de \mathbf{H} associadas respectivamente a λ_1 e λ_3 . Desta maneira, $|\alpha_1|^2 + |\alpha_3|^2 = 1$. Após fixar o ψ , que foi preparado para estar nesta forma, é que iremos fazer a medição via o observável $A = \mathbf{H}$. Quando medimos várias vezes (estamos com um observável A fixo) a sua energia, digamos 1000 vezes, e, calcularmos o número a_{1000} de vezes que "observamos" o valor de energia λ_1 , obtemos o valor aproximado

$$\frac{a_{1000}}{1000} \sim |\alpha_1|^2.$$

Um descrição interessante sobre a diferença entre medições repetidas e medições sucessivas aparece na página 53 na seção 4.3a em [113].

O desenvolvimento a seguir vai ilustrar o papel dos observáveis na Mecânica Quântica.

Seja $\langle \psi_t(x), x_2 \psi_t(x) \rangle = \int x_2 \|\psi_t(x)\|^2 dx$, então, usando a equação de Schrödinger e o Lemma 3.3 temos que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \psi_t, x_2 \psi_t \rangle &= \left\langle \frac{d}{dt} \psi_t, x_2 \psi_t \right\rangle + \langle \psi_t, x_2 \frac{d}{dt} \psi_t \rangle \\ &= \left\langle \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H} \psi_t, x_2 \psi_t \right\rangle + \langle \psi_t, x_2 \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H} \psi_t \rangle \\ &= \left\langle \psi_t, \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}(x_2 \psi_t) \right\rangle - \langle \psi_t, x_2 \frac{i}{\hbar} \mathbf{H} \psi_t \rangle \\ &= \left\langle \psi_t, \frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \mathcal{X}_2] \psi_t \right\rangle \\ &= \frac{1}{m} \langle \psi_t, -i\hbar \frac{\partial \psi_t}{\partial x_2} \rangle \end{aligned} \quad (4.1)$$

De forma semelhante se mostra que para qualquer $j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$ vale

$$\frac{d}{dt} \langle \psi_t, x_j \psi_t \rangle = \frac{1}{m} \langle \psi_t, -i\hbar \frac{\partial \psi_t}{\partial x_j} \rangle.$$

Segue disto que

$$m \frac{d}{dt} \langle \mathcal{X}_j \rangle_{\psi_t} = \langle -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \rangle_{\psi_t} = \langle \mathcal{P}_j \rangle_{\psi_t}.$$

Recuperamos assim, via valor esperado, uma expressão semelhante à correspondente clássica, ou seja, é verdadeiro para qualquer $j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$ que

$$mx'_j(t) = m \frac{d}{dt} x_j(t) = p_j(t).$$

Da mesma forma, se pode mostrar também que para qualquer $j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$ vale

$$\frac{d}{dt} \langle \mathcal{P}_j \rangle_{\psi_t} = \frac{d}{dt} \langle \psi_t, \mathcal{P}_j(\psi_t) \rangle = \langle -\frac{\partial V}{\partial x_j} \rangle_{\psi_t}.$$

Assim recuperamos, via valor médio, também a expressão clássica em termos de colchete de Poisson $p'_j = \{H, p_j\} = -\frac{\partial V}{\partial x_j}$.

Reunindo as duas expressões, para todo t , temos que para qualquer $j \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$ vale

$$m \frac{d}{dt} \langle \mathcal{X}_j \rangle_{\psi_t} = \langle \mathcal{P}_j \rangle_{\psi_t}, \quad \text{e} \quad \frac{d}{dt} \langle \mathcal{P}_j \rangle_{\psi_t} = \langle -\frac{\partial V}{\partial x_j} \rangle_{\psi_t}.$$

Desta forma recuperamos (num certo sentido) as Leis de Newton (e a equação de Hamilton) ao tomarmos os valores médios dos observáveis envolvidos.

Assim, o que representaria a versão quântica da velocidade clássica seria o operador $\frac{1}{m} \mathcal{P}$.

Vamos generalizar as expressões acima para um operador autadjunto A qualquer.

Lema 4.1. *Seja A autoadjunto, e, ψ_t satisfazendo a equação de Schrödinger, então, para todo t*

$$\frac{d}{dt} \langle \psi_t, A\psi_t \rangle = \langle \psi_t, \frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, A] \psi_t \rangle.$$

Ou, de forma equivalente,

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\psi_t} = \langle \frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, A] \rangle_{\psi_t}.$$

Este resultado é conhecido como Teorema de Ehrenfest.

Demonstração:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}\langle\psi_t, A(\psi_t)\rangle &= \left\langle\frac{d}{dt}\psi_t, A(\psi_t)\right\rangle + \langle\psi_t, A(\frac{d}{dt}\psi_t)\rangle \\
 &= \left\langle\frac{1}{i\hbar}\mathbf{H}(\psi_t), A(\psi_t)\right\rangle + \langle\psi_t, A(\frac{1}{i\hbar}\mathbf{H}(\psi_t))\rangle \\
 &= \langle\psi_t, \frac{i}{\hbar}\mathbf{H}(A(\psi_t))\rangle - \langle\psi_t, A(\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}(\psi_t))\rangle \\
 &= \langle\psi_t, \frac{i}{\hbar}[\mathbf{H}, A](\psi_t)\rangle.
 \end{aligned}$$

■

Vamos elaborar mais sobre o resultado acima na seção 1.13 de [189].

Fazendo aqui um paralelo com a Mecânica Clássica do resultado acima lembramos que se pode mostrar ([184] Ex 6 seção 3.2) que dado $F(x, p)$, $F : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}$, e sua evolução ao longo de uma solução da equação de Hamilton $(x(t), p(t))$, então vale que

$$\frac{d}{dt}F(x(t), p(t)) = \{F, H\}(x(t), p(t)),$$

onde $\{, \}$ denota o colchete de Poisson.

Uma integral primeira para equação de Hamilton (para um Hamiltoniano H) é uma função F que é constante ao longo da evolução temporal $(x(t), p(t))$, ou seja, tal que $\frac{d}{dt}F(x(t), p(t)) = 0$; uma condição suficiente para isto é que $\{F, H\} = 0$.

De forma análoga, se desejamos obter um observável A tal que o valor esperado ao longo da evolução temporal descrita pela equação de Schrodinger (associada ao Hamiltonian \mathbf{H}) seja constante, então segue do Lema acima que basta obter A tal que $[\mathbf{H}, A] = 0$. Note que como $[\mathbf{H}, \mathbf{H}] = 0$ então o valor esperado de \mathbf{H} não muda ao longo da evolução temporal do estado pela dinâmica de Schrodinger.

Como dissemos antes, o sentido físico de um determinado observável A está associado a uma medição obtida via algum aparelho. Dada uma partícula que se encontra num estado ψ , podemos medir a energia, o momento, e outras grandezas pertinentes.

Definição 4.2. A energia média de uma partícula no estado ψ sob a ação de \mathbf{H} é

$$E_{\psi}(\mathbf{H}) = \langle \psi, \mathbf{H}\psi \rangle = \langle \psi, \left[\frac{\mathcal{P}^2}{2m} + \mathcal{V} \right](\psi) \rangle .$$

Se ψ é autofunção normalizada de \mathbf{H} associada ao autovalor λ , então, $E_{\psi}(\mathbf{H}) = \lambda$.

O operador observável I corresponde a não observar (não medir nada).

Note primeiro que estes observáveis quânticos A envolvem conceitos que em geral possuem análogos clássicos. Quando a massa m é muito pequena devemos proceder de maneira diferente (da clássica), e assim, surge o cenário quântico. Em segundo lugar note que para calcular uma probabilidade associada ao observável A se faz necessário um estado ψ (que por sua vez envolve a posição x da partícula). Dito isto, podemos prosseguir.

Observáveis no Setting Clássico: suponha que uma densidade $f(x)$, onde temos que $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, descreve a probabilidade da posição x , mais exatamente, a probabilidade de encontrar x no conjunto C seria $\int_C f(x) dx \geq 0$.

A média da posição x seria $\bar{x} = \int x f(x) dx$.

Um observável clássico, dependente da posição x , seria uma função contínua $g(x)$, onde $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

Definição 4.3. O valor esperado, ou média, do observável clássico g seria

$$E_f(g) = \bar{g}_f = \int g(x) f(x) dx .$$

Vamos supor que o observável clássico g está fixo, e, consideramos várias possíveis densidades f . Uma possibilidade de densidade f seria, por exemplo, um $|\psi|^2$ oriundo do mundo quântico.

POSTULADO 3. Para cada observável clássico $g(x)$, $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ (não necessariamente contínuo), corresponde um operador autoadjunto A com domínio denso em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$, tal que, para todo ψ em $D(A)$ vale

$$\bar{g}_{|\psi|^2} = \langle \psi, A\psi \rangle .$$

Se B é autoadjunto e $D(A) \subset D(B)$ e, para todo $\psi \in D(A)$

$$\overline{g}_{|\psi|^2} = \langle \psi, B\psi \rangle,$$

então $B = A$.

Dado o observável clássico g , o associado A será denotado por Q^g . Assim, para qualquer tal $\psi \in D(A)$ vale

$$\int g(x) |\psi(x)|^2 dx = \int \psi(x) \overline{Q^g(\psi)(x)} dx.$$

Por exemplo, dado $g(x) = x^2$, temos que $Q^{x^2} = \mathcal{X}^2$. Será importante considerar tal expressão para funções que não são analíticas nem mesmo contínuas, como por exemplo $g(x) = I_{(-\infty, c)}(x)$, onde c é um número real. A associação para o caso de observáveis da forma $g(x)$ será abordada num exemplo na seção 2.1 de [189] após a apresentação do Teorema Espectral.

Observáveis clássicos da forma $g(x, p)$ também podem ser quantizados. A associação ao operador quantizado $\mathcal{O}_p^W g$ a um dado observável clássico da forma $g(x, p)$ será feita via a quantização de Weyl na seção 2.16 de [189].

Vamos ilustrar num exemplo simples (ver [202] and [94]) o procedimento de quantização de observáveis clássicos da forma $g(x, p)$, onde $x \in [0, 2\pi]$ (ou, o círculo unitário S^1).

Vamos associar a função real $g(x, p)$ um operador autoadjunto L agindo em \mathcal{L}^2 .

Dada uma função periódica $u : [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{C}$ em $\mathcal{L}^2(dx, [0, 1])$, podemos escreve-la em termos de série de Fourier (ver por exemplo [39])

$$u(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{u}(k) e^{-i k x},$$

onde $\hat{u}(k)$ são coeficientes de Fourier de u .

A série de Fourier da derivada de u pode ser obtida através dos coeficientes de Fourier $\hat{u}(k)$, $k \in \mathbb{Z}$, via

$$\frac{du(x)}{dx} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-i k) \hat{u}(k) e^{-i k x}.$$

Disto segue que

$$\frac{d^2 u(x)}{d^2 x} = - \sum_{n=-\infty}^{\infty} k^2 \hat{u}(k) e^{-i k x}.$$

Identificamos z em S^1 com $[0, 2\pi)$ via $z = e^{-ix} = \cos(-x) + i \operatorname{sen}(-x)$, onde $x \in [0, 2\pi)$.

Assim, temos que

$$u(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{u}(k) z^k.$$

Seja $g : S^1 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ dada, então para $\hbar > 0$, e $u : S^1 \rightarrow \mathbb{C}$ em $L^2(S^1, \mathbb{C})$ denotamos

$$Op_{\hbar}(g)(u)(z) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} g(z, \hbar k) \hat{u}(k) z^k.$$

Assim, dado u obtemos uma nova função $Op_{\hbar}(g)(u)$ na variável z . Isto define um operador $Op_{\hbar}(g)$, denominado a quantização do observável clássico $g(x, p)$:

$$Op_{\hbar}(g) : L^2(S^1, \mathbb{C}) \rightarrow L^2(S^1, \mathbb{C}).$$

Quando g é constante e igual a 1, então, $Op_{\hbar}(g)$ é a identidade.

Se $g(z, p) = V(z)$, $V : S^1 \rightarrow \mathbb{R}$, então, $Op_{\hbar}(g)$ é a multiplicação por V , ou seja o operador \mathcal{V} .

Se $g(z, p) = p$, então $Op_{\hbar}(g)(u) = i \hbar \frac{d u}{d z}$.

Se $g(z, p) = \frac{p^2}{2m}$, então $Op_{\hbar}(g)(u) = -\frac{1}{2m} \hbar^2 \frac{d^2 u}{d^2 z}$.

Sendo assim, se $g(z, p) = \frac{p^2}{2m} + V(z)$, então

$$Op_{\hbar}(g)(u)(z) = -\frac{1}{2m} \hbar^2 \frac{d^2 u}{d^2 z}(z) + V(z)u(z),$$

que é o operador de Schrodinger.

O desenvolvimento acima mostra que é natural a associação de g ao operador $L = Op_{\hbar}(g)$.

Existem observáveis que são naturais na teoria mas que não são obtidos via a associação com uma $g(x, p)$.

POSTULADO 4. *Fixado o estado ψ , suponha que medição seja descrita por $A = \sum_n \lambda_n P_{\varphi_n}$, onde os φ_n formam um conjunto ortonormal enumerável completo, e, os autovalores correspondentes são denotados λ_n . Se o resultado obtido for um determinado λ_k que tem multiplicidade 1, então o estado ψ , imediatamente após a medição, passa a ser φ_k (colapsa).*

Considerações interessantes sobre este "colapso" aparecem na seção 5.12 de [11].

No caso em que o espaço de Hilbert tem dimensão finita o fenômeno descrito acima é descrito com detalhes em [8]. Uma interessante discussão sobre a distinção entre "agir novamente no mesmo sistema e realizar o mesmo experimento" pode ser encontrada na seção 6.1.2 do mencionado texto.

Alguns dos operadores $A = \sum_n \lambda_n P_{\varphi_n}$, que aparecem nos problemas reais físicos são tais que eventualmente um autovalor pode não ter multiplicidade 1. Neste caso o postulado correspondente é mais complexo e não vamos elaborar sobre o assunto.

Note que antes de se fazer uma observação o estado tem o potencial de, ao ser subsequentemente medido, produzir como resposta qualquer um dos autovalores do operador. Temos assim, prévio a observação, uma grande indeterminação. O estado está em "estado latente". Após a observação, ao se produzir um determinado autovalor, a nossa ignorância do resultado desapareceu. Este postulado ficará bastante natural quando analisarmos o conceito de dispersão do estado e sua relação com autovalores na seção 8.

O estado da partícula ψ é um elemento de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$. Ele é uma "potencialidade" de possíveis eventos. É somente ao ser observado que ele produz uma "resultado". E, este, depende de qual observável A está "medindo" ψ .

Não é tão simples ilustrar a afirmação acima de que o estado ψ , imediatamente colapsa após uma medição. O colapso de ψ , passando instantaneamente a ser φ_k , ao se obter a medição λ_k tem aplicações interessantes em teleporte na Teoria da Informação Quântica. Isto é brevemente descrito no apêndice da seção 2.7 de [189] e permite entender melhor o sentido do Postulado acima.

Fixado um estado ψ , sob a observação de A , será natural para o seu entendimento estatístico, expressar ψ através do conjunto ortonormal completo dos autovetores de A . Se observarmos o mesmo ψ através de um outro observável B , será natural, para o seu entendimento estatístico, expressar ψ através do conjunto ortonormal completo dos autovetores de B .

Se A e B comutam, então, como já dissemos antes, certos estados ψ (os autovetores comuns) podem ser preparados de forma que se possa medir simultaneamente A e B com infinita precisão. O Teorema 1.7 irá ajudar a entender melhor tal afirmação. Em geral dados dois observáveis A e B eles não comutam (ver considerações interessantes na seção 5.12 de [11]).

O postulado acima possui uma versão mais geral que contempla qualquer operador autoadjunto mas não vamos aqui tratar deste assunto (ver [99] ou 5.1.2 em [11]).

Fixada uma condição inicial ψ_0 , a expressão acima $\langle \psi_t, A(\psi_t) \rangle$ pode também ser escrita como

$$\begin{aligned} \langle \psi_t, A(\psi_t) \rangle &= \langle e^{-t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}}(\psi_0), A(e^{-t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}}(\psi_0)) \rangle = \\ &= \langle \psi_0, e^{t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}} A e^{-t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}}(\psi_0) \rangle. \end{aligned}$$

Se denotarmos

$$A(t) = e^{t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}} A e^{-t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}},$$

teremos que

$$\langle A \rangle_{\psi_t} = \langle A(t) \rangle_{\psi_0}.$$

Note que $A(t)$ é autoadjunto porque $e^{t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}}$ é unitário e A é autoadjunto.

É usual denominar o ponto de vista de considerar a evolução temporal da condição inicial via o estado ψ_t em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$, e, depois estimar o valor esperado de A de **ponto de vista de Schrödinger** (lado esquerdo). Neste caso a evolução temporal é do estado e o operador A está fixo.

Por outro lado, é usual denominar o ponto de vista de considerar a evolução temporal $A(t)$ do observável de **ponto de vista de Heisenberg** (lado direito). De forma mais precisa, considere a evolução do observável $A(t)$, para uma dada condição inicial $A(0) = A$, sujeita a equação

$$-i\hbar \frac{d}{dt}A(t) = [\mathbf{H}, A(t)].$$

Esta equação corresponde a de Schrödinger mas agora no contexto da evolução temporal de observáveis (operadores).

A solução $A(t)$ da última equação pode ser expressa da forma explícita - ponto de vista da evolução temporal de Heisenberg - através de

$$A(t) = e^{t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}} A e^{-t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}}.$$

O **ponto de vista de Heisenberg** trata de operadores (e sua evolução temporal) enquanto o **ponto de vista de Schrödinger** considera estados no espaço de Hilbert (e sua evolução temporal).

Suponha agora que $A = \sum_n \lambda_n P_{\varphi_n}$ e $B = \sum_m \beta_m P_{\phi_m}$ são dois operadores autoadjuntos que não comutam. Qual o sentido de observar A e depois B ?

Dado o estado ψ , pelo Postulado 4, a medição por A resulta em um certo φ_{n_0} . A medição sob B feita após esta medição vai ter probabilidade $|c_m|^2$ de resultar em β_m se $\varphi_{n_0} = \sum_m c_m \phi_m$.

No caso em que o espaço de Hilbert tem dimensão finita o fenômeno descrito acima é descrito com detalhes em na seção 6.1.3 [8].

Dado um certo estado $\psi = a(0, 1) + b(1, 0) \in \mathbb{C}^2$, $a, b \in \mathbb{C}$ podemos modificá-lo via o uso de aparelhos em laboratório. Desta forma podemos preparar em laboratório um estado de uma certa forma desejada. Isto é descrito de forma matemática via a ação de um operador unitário U e assim se pode obter um novo estado $U(\psi)$. Não estamos fazendo com isto uma medição. Uma medição seria descrito pela ação de um operador autoadjunto $A = \sum_{j=1}^2 \lambda_j P_{\phi_j}$. Ao medir por A o sistema no estado ψ se obtém como resultado um autovalor de A , digamos λ_2 . O estado ψ então colapsa no autovetor associado ϕ_2 . O uso de portas lógicas descritas por operadores unitários como acima

é útil em Informação Quântica. Uma breve descrição deste tópico aparecerá no apêndice ao fim da seção 2.7 de [189].

Da mesma forma, dado o estado $\psi \in \mathcal{L}^2(dx)$, podemos aplicar a ele um operador unitário U e assim obter $U(\psi)$. Pode-se assim preparar o sistema quântico de acordo com conveniência e obter um $U(\psi)$ que eventualmente é útil para alguma ação subsequente.

Na Álgebra Comutativa (usando o produto usual) das funções (observáveis clássicas) que tomam valores complexos isto não ocorre, ou seja, vale sempre que $f(x)g(x) = g(x)f(x)$.

A^2 não representa observar A , e depois, ao que foi obtido, observar A de novo.

Se a partícula estivesse no estado ψ , então,

$$E(A^2)_\psi = \langle \psi, A^2(\psi) \rangle = \int \psi(x) \overline{A^2(\psi)(x)} dx.$$

Podemos considerar também funções arbitrárias envolvendo o operador observável A . Isto será de grande importância na seção 2.1 e 2.3 de [189].

O próximo postulado é uma espécie de generalização do anterior.

Um exemplo pictórico, mas interessante é o seguinte: fixado um Hamiltoniano \mathbf{H} considere um estado $\psi = \sum_j \lambda_j \varphi_j$, onde os φ_j são autovetores com os distintos níveis de energia de \mathbf{H} e λ_j os correspondentes autovalores. Considere agora um operador projeção que vai representar um aparato (uma espécie de filtro) que deixará passar apenas os que tem energia $\lambda_n, \lambda_{n+1}, \dots, \lambda_k$ (associados respectivamente aos autovetores $\varphi_n, \varphi_{n+1}, \dots, \varphi_k$). Vamos descrever o que de fato ocorre no cenário quântico através do seguinte postulado que sintetiza muitas das nossas considerações anteriores:

POSTULADO 5. *Suponha que ψ seja da forma $\psi = \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j \varphi_j$. Suponha que se possa aplicar no estado inicial ψ , um "filtro" descrito por um "aparato" que deixa passar apenas $\sum_{j=n}^k \lambda_j \varphi_j$, ou seja a parte que corresponde aos estados que tem autovalor $\lambda_n, \lambda_{n+1}, \dots, \lambda_k$.*

Se a medição resultar em um certo λ_j , $j = n, n+1, \dots, k$, o estado passa a ser φ_j . A probabilidade da ocorrência de λ_j é igual a

$$\frac{|c_j|^2}{|c_n|^2 + |c_{n+1}|^2 + \dots + |c_k|^2}.$$

Uma discussão interessantes sobre certos aspectos relacionados com o Postulado acima aparecem em 5.1.2 em [11].

Um foton ao passar por certos tipos de cristal se transforma em uma combinação linear de duas autofunções (aqui apareceu a projeção) em que cada uma delas corresponde a um tipo de spin. Esta não é uma medição. Um outro anteparo subsequente vai poder depois fazer uma medição em que as duas possibilidades poderão resultar como output.

O que ocorre em termos de medição quando dois operadores autoadjuntos A e B comutam? Uma discussão interessante sobre o assunto aparece em 5.1.2 em [11]. O próximo resultado vai auxiliar neste entendimento.

Teorema 4.2. *Suponhamos que os operadores compactos autoadjuntos A e B comutem. Então existe um conjunto enumerável ortonormal completo φ_n , $n \in \mathbb{N}$, comum aos dois operadores.*

Ou seja, é possível escrever A e B da forma

$$A = \sum_n c_n P_{\varphi_n}$$

e

$$B = \sum_n d_n P_{\varphi_n}.$$

Ou seja, é possível usar um sistema comum de projetores.

Demonstração:

Denote por $|\alpha_n \rangle$ e $|\beta_n \rangle$, $n \in \mathbb{N}$, respectivamente, os dois conjuntos enumeráveis ortonormais completos associados a A e B . Seus respectivos autovalores são denotados por a_n e b_n , $n \in \mathbb{N}$.

Ora, para n fixo, denote por $N = N_n$ o núcleo de $(A - a_n I)$. Note que este espaço pode não ser unidimensional.

Note que como $AB = BA$, temos que, para cada n , o operador B deixa N_n invariante. De fato, seja $v \in N_n$,

$$\begin{aligned} A(B(v)) - a_n I(B(v)) &= B(A(v)) - a_n B(I(v)) = \\ &= B[(A(v)) - a_n I(v)] = 0. \end{aligned}$$

Observe agora que a restrição de B a N_n define também um operador autoadjunto. Via o Teorema espectral aplicado a $B|_{N_n}$ podemos então encontrar um conjunto ortonormal completo de autovetores para $B|_{N_n}$.

O resultado segue de aplicar o raciocínio acima para cada N_n , $n \in \mathbb{N}$. ■

Assim, se os operadores comutam eles podem ser simultaneamente diagonalizados. Os seus respectivos autovetores são comuns.

Suponha que A e B comutam e estejam sob as hipóteses do resultado acima. Fixado um estado ψ podemos tomar um conjunto ortonormal completo de autofunções comum $\varphi_n, n \in \mathbb{N}$ e realizar a medição de $\psi = \sum_n c_n \varphi_n$ primeiro via A e depois via B . Para um determinado n fixado a probabilidade do resultado c_n (obtido via a medição A) é a mesma do resultado d_n (obtido via medição B).

A sequência de medições primeiro A e depois B vai resultar na mesma estatística que se fosse feito primeiro B e depois A . Para mais detalhes sobre o assunto referimos o leitor a seção 6.1.3 em [8] onde a noção de testes compatíveis e incompatíveis é apresentada.

POSTULADO 6. *Uma função de um observável quântico é um observável quântico. Assim, se A é o operador observável associado ao clássico $g : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ (não necessariamente contínuo), segundo o Postulado 3, então, A^n é o correspondente a $g^n = \underbrace{g \times g \times \dots \times g}_n$.*

Desta forma, tomando como exemplo um observável clássico da forma $g(x)$, e seu operador associado A , então para qualquer tal $\psi \in$

$D(A)$ vale

$$\int g(x)^2 |\psi(x)|^2 dx = \int \psi(x) \overline{A^2(\psi)(x)} dx.$$

Denotamos por Q^g o operador autoadjunto associado ao observável clássico g (uma função real).

Assim, se considerarmos uma função analítica $f(\lambda)$, vale

$$\int f(g(x)) |\psi(x)|^2 dx = \int \psi(x) \overline{f(Q^g)(\psi)(x)} dx.$$

O observável B vai agir sobre um certo estado ψ . Suponha que escolhamos um certo ψ específico. Num experimento real, é preciso prepará-lo para se obter tal ψ . Questões interessantes envolvendo este tópico podem ser obtidas em [15]. Uma estratégia natural seria encontrar um potencial V que tivesse como ground state tal ψ . Assim, ao observarmos via o correspondente $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \mathcal{V}$ um ϕ qualquer, pelo Postulado 4 obteríamos com alta probabilidade o almejado ψ . Após isto, então aplicamos o operador observável B ao resultado obtido (aplicar antes \mathbf{H}).

Capítulo 5

Transformada de Fourier

Será necessário para a apropriada descrição do momento na Mecânica Quântica o entendimento de algumas propriedades básicas da Transformada de Fourier.

A transformada de Fourier \mathcal{F} vai agir em funções ψ em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$.

$$\psi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C} \xrightarrow{\mathcal{F}} \hat{\psi} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}.$$

Usaremos a notação $\mathcal{F}(\psi) = \hat{\psi}$.

Uma excelente referencia para os assuntos apresentados brevemente aqui é section 3 do chapter 3 de [269] (ver também [241], [242] ou [265]). O tópico é descrito de maneira mais elementar (mas suficiente boa para o que precisamos aqui) em [39].

Vamos assumir que ψ age numa variável denotada por $x \in \mathbb{R}^n$, e, $\hat{\psi}$ age numa variável denotada por $p \in \mathbb{R}^n$

Definição 5.1. Dado $\psi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$, uma função na variável x , denotamos para cada $p \in \mathbb{R}^n$

$$\hat{\psi}(p) = (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int e^{\frac{-i\langle p, x \rangle}{\hbar}} \psi(x) dx.$$

Fica definida assim a função $\hat{\psi} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$, na variável p , que se

denomina a Transformada de Fourier de ψ (mais detalhes em [242] [39] [157]).

A transformada de Fourier \mathcal{F} agindo em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$ preserva a norma do espaço de Hilbert. Ou seja, se $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$, então também vale que $\int |\hat{\psi}(x)|^2 dx = 1$. Note a existência de \hbar na expressão acima.

Teorema 5.1. *Teorema de Plancherel [242] [57] [245] [39]: \mathcal{F} é um operador linear unitário em $\mathcal{L}^2(dx)$, i.e., preserva a norma em $\mathcal{L}^2(dx)$.*

Se ψ é uma função real par, ou seja, se para todo x real vale $\psi(x) = \psi(-x)$, então, sua transformada de Fourier é uma função real. Isto segue de fazer a mudança de coordenadas $y \rightarrow -x$ abaixo

$$\hat{\psi}(p) = (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int e^{\frac{i(p,y)}{\hbar}} \psi(y) dy = \overline{\hat{\psi}(p)}.$$

Um fato importante é o seguinte ([39] [242]): se $\text{Re}(a^2) > 0$.

$$e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \xrightarrow{\mathcal{F}} \left(\frac{a^2}{\hbar^2}\right)^{\frac{n}{2}} e^{-\frac{a^2|p|^2}{2\hbar^2}}.$$

Sabe-se que para x_0 e a fixos, temos que

$$\phi(x) = \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}}$$

é tal que $\int \phi(x) dx = 1$.

Tal ϕ é denominada de distribuição (ou densidade) Gaussiana de média x_0 e variância a .

Ainda, vale que

$$\int \phi(x) x dx = x_0$$

e

$$\int \phi(x) (x - x_0)^2 dx = \int \phi(x) (x - [\int \phi(x) x dx])^2 dx = a^2.$$

Para $x = 0$ vale independente de a que existe um valor fixo para a integral da ϕ acima em

$$\int_{-a}^a \phi(x) dx = 0.682\dots$$

Esta função ϕ é conhecida com a densidade Gaussiana de média zero e variância $a > 0$. Quanto mais pequeno for a , mais concentrada em torno do zero esta a densidade. Quanto maior for o a então mais "esparrramada" vai ficar a densidade ψ .

Ainda, quando $n = 1$, e fixado a , segue da expressão acima que a transformada de Fourier da densidade Gaussiana de média zero e variância ($a > 0$) é densidade Gaussiana de média zero e variância $\frac{1}{a}$. Assim, a Transformada de Fourier leva Gaussianas concentradas em torno de zero em Gaussianas esparrramadas, e, vice versa. Esta é a primeira manifestação matemática do Princípio da Incerteza que será considerado em breve. Destacamos que, mais geralmente, vale que funções muito concentradas "concentradas em torno de zero" (pouca dispersão) são levadas pela transformada de Fourier em funções "muito esparrramadas em torno do zero" (grande dispersão), e, vice versa. Isto será cuidadosamente analisado em breve.

Estaremos interessados, entre outras, na função de onda

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{1}{a\sqrt{2\pi}}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2}},$$

que é tal que $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$. Assim, $|\psi(x)|^2$ é a densidade Gaussiana de média x_0 e variância (ou, dispersão) $a > 0$. Propriedades similares ao caso anterior também ocorrem.

A delta de Dirac no ponto x_0 pode ser entendida como o "limite" de uma distribuição Gaussiana com média x_0 e variância a , quando $a \rightarrow 0$.

Se A é uma matriz simétrica positiva definida $n \times n$

$$e^{-\frac{1}{2\hbar}\langle x, A^{-1}(x) \rangle} \xrightarrow{\mathcal{F}} (\hbar)^{\frac{n}{2}} (\det A)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\langle p, Ap \rangle}$$

Se $n = 3$ e $b > 0$

$$\sqrt{\frac{\pi}{2\hbar}} \frac{e^{-\sqrt{b/\hbar^2}|x|}}{|x|} \xrightarrow{\mathcal{F}} (|p|^2 + b)^{-1}$$

Ainda, para $a > 0$ fixo, temos que $\mathcal{F}(I_{(-a,a)}(x))(p) = c \frac{\text{sen}(ap/\hbar)}{p/\hbar}$, onde c é constante (ver [39]).

Definição 5.2. A adjunta de \mathcal{F} , que denotaremos por $\mathcal{F}^* = \mathcal{F}^{-1}$, é dada por

$$\mathcal{F}^* : \psi \rightarrow \check{\psi}(x) = (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int e^{\frac{i\langle x,p \rangle}{\hbar}} \psi(p) dp.$$

Denominamos de transformada de Fourier inversa tal função \mathcal{F}^* . Ou seja, $\check{\psi}$ é a transformada de Fourier inversa de ψ .

Assim,

$$f(s) = (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int e^{\frac{-i\langle s,x \rangle}{\hbar}} \check{f}(x) dx.$$

Note o chapéu invertido na expressão acima.

Isto significa que $\mathcal{F}^*(\hat{\psi}) = \psi$. De outra forma, para qualquer ψ em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$ vale que $(\mathcal{F}^* \circ \mathcal{F})(\psi) = \psi = (\mathcal{F} \circ \mathcal{F}^*)(\psi)$.

A diferença entre \mathcal{F} e \mathcal{F}^* está no sinal que multiplica i no termo $e^{\frac{i\langle x,p \rangle}{\hbar}}$ da integral.

Se pode considerar mais geralmente a transformada de Fourier de uma função generalizada (também chamada de distribuição) conforme será descrito na seção 13.

Note que para p fixo, a função $\phi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar} \langle p,x \rangle}$ é solução de $\mathbf{H}_0(\phi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta(\phi) = \lambda\phi = \frac{|p|^2}{2m} \phi$. A função ϕ não é autofunção de \mathbf{H}_0 pois não está em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$ ($\int |\phi(x)|^2 dx$ não é finito). No entanto, uma combinação (integrada) de distintas $\phi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar} \langle p,x \rangle}$, em princípio, poderia.

Queremos dizer com isto que $\psi(x) = \int g(p) e^{-\frac{i}{\hbar} \langle p,x \rangle} dp$, para algum certa g , pode ser um elemento em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$. Em resumo, a transformada de Fourier inversa pode ser pensada como um procedimento para combinar de forma ponderada distintas "quase autofunções" de \mathbf{H}_0 .

Note também que se tomarmos como g a delta Dirac em p_0 , então, $\mathcal{F}^*(\delta_{p_0}(p)) = (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \langle p_0,x \rangle}$. De outra forma, no sentido de distribuições (mais detalhes na seção 1.14) temos que

$$\mathcal{F}((2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \langle p_0,x \rangle}) = \delta_{p_0}(p).$$

Algumas propriedades da transformada de Fourier são:

$$1) \widehat{-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_j}}(p) = p_j \widehat{\psi}(p)$$

Demonstração: Vamos mostrar o resultado para $n = 1$. Suponha que ψ tenha suporte compacto e seja diferenciável. Então, via integração por partes, dado \hbar e p , vale

$$\psi(x) \cos((px)/\hbar) \Big|_{-R}^R = \int \psi'(x) \cos((px)/\hbar) dx - p/\hbar \int \psi(x) \text{sen}((px)/\hbar) dx.$$

Uma fórmula similar vale para $\psi(x) \text{sen}((px)/\hbar)$. Como $e^{zi} = \cos(z) + i \text{sen}(z)$, quando z é real, então a fórmula desejada segue do descrito acima.

No caso $n = 1$, para $\psi(x)$ vale $-i\hbar \widehat{\psi'}(p) = p \widehat{\psi}(p)$.

No caso n dimensional temos a expressão equivalente: para todo j

$$\widehat{\mathcal{P}_j(\psi)}(p) = -i\hbar \frac{\partial \widehat{\psi}}{\partial x_j}(p) = p_j \widehat{\psi}(p)$$

■

2) Aplicando duas vezes o resultado acima, temos, no caso $n = 1$, que para $\psi(x) \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ vale

$$-\hbar^2 \widehat{\psi''}(p) = p^2 \widehat{\psi}(p)$$

$$3) \mathcal{F}(\psi(x) e^{ax}) = \widehat{\psi}(p - \hbar a i).$$

Demonstração: Vamos demonstrar no caso $n = 1$.

O resultado segue de

$$\begin{aligned} \widehat{\psi}(p) &= (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \psi(x) e^{ax} dx = \\ &(2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int e^{\frac{-i(px - \hbar ai)}{\hbar}} \psi(x) dx. \end{aligned}$$

■

As seguintes expressões seguem de mudança de variável e integração por partes [39].

$$5) \widehat{x\psi}(p) = i\hbar \nabla_x \widehat{\psi}(p)$$

$$6) \mathcal{F}(\psi(x-a)) = e^{\frac{-i}{\hbar} \langle a, p \rangle} \widehat{\psi}(p).$$

Outra expressão equivalente a esta é $\mathcal{F}(\psi(x) e^{-ip_0 x}) = \widehat{\psi}(p_0 - p)$.

Como a transformada de Fourier leva densidades Gaussianas em densidades Gaussianas, aplicando a expressão acima obtemos para a, p_0 fixados que

$$\mathcal{F}\left(\frac{e^{-\frac{x^2}{2a^2}} e^{-ip_0 x}}{\sqrt{2\pi a}}\right) = c e^{\frac{-(p-p_0)^2}{2\frac{1}{a^2}}}.$$

A relevância deste resultado vai aparecer quando analisarmos o pacote de ondas Gaussiano [53] [250].

A partir de 6) e do conhecimento de $\mathcal{F}(I_{(-a,a)}(x))(p)$ se pode calcular facilmente $\mathcal{F}(I_{(c,d)}(x))(p)$ para qualquer intervalo real (c, d) .

Definição 5.3. A função em x dada por $(f * g)(x) = \int_{\mathbb{R}^n} f(y)g(x-y)dy$ é denominada de convolução de f e g .

$$7) \widehat{\phi\psi} = (2\pi\hbar)^{-n/2} \widehat{\psi} * \widehat{\phi}$$

Demonstração: Note que de 3) segue que para um fixo x , a transformada na variável ξ satisfaz $\widehat{\phi}(x-\xi) = \mathcal{F}(\phi(p) e^{\frac{i\xi}{\hbar} p})$. Disto segue

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\phi\psi)(x) &= (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int (\phi(p) \psi(p)) e^{\frac{-i p x}{\hbar}} dp = \\ &= \int (\phi(p) e^{\frac{-i p x}{\hbar}} [\int e^{\frac{i p \xi}{\hbar}} \widehat{\psi}(\xi) d\xi]) dp = \\ &= \int \widehat{\psi}(\xi) [\int e^{\frac{i p \xi}{\hbar}} \phi(p) e^{\frac{-i p x}{\hbar}} dp] d\xi = \\ &= (2\pi\hbar)^{-n/2} \int \widehat{\psi}(\xi) \widehat{\phi}(x-\xi) d\xi = (2\pi\hbar)^{-n/2} \widehat{\psi} * \widehat{\phi}. \end{aligned}$$

■

$$8) \widehat{\phi * \psi} = (2\pi\hbar)^{\frac{n}{2}} (\widehat{\phi} \cdot \widehat{\psi})$$

A demonstraçãõ deste fato é similar ao caso anterior.

9) Para qualquer $\phi, \psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$ vale

$$\langle \phi, \psi \rangle = \langle \widehat{\phi}, \widehat{\psi} \rangle.$$

Demonstraçãõ:

Isto segue do fato que o operador linear \mathcal{F} é uma isometria em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$ e da identidade da polarizaçãõ [241]

$$\langle \psi, \phi \rangle = \frac{1}{4} (|\psi + \phi|^2 - |\phi - \psi|^2 - i|\phi + i\psi|^2 + i|\phi - i\psi|^2).$$

■

Propriedades análogas as descritas acima para a transformada de Fourier valem para a Transformada inversa de Fourier. Por exemplo

$$10) \mathcal{F}^*(\phi\psi)(x) = (2\pi\hbar)^{-n} [\mathcal{F}^*(\psi) * \mathcal{F}^*(\phi)].$$

Para concluir observamos que a Transformada de Fourier é uma ferramenta de fundamental utilidade e importância na análise de estados sobre \mathbb{R}^n , mas, que, infelizmente, não se dispõe de análogos simples que possam fazer seu papel em uma variedade diferenciável compacta qualquer.

Capítulo 6

O Momento via Transformada de Fourier

Afirmamos antes (no começo da seção 1.3) que

$$\langle \mathcal{P}_j \rangle_{\psi_t} = \langle \psi_t, \mathcal{P}_j(\psi_t) \rangle =$$

$$\int \psi_t(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \overline{-i \hbar \psi_t(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)} \right] dx_1 \dots dx_n,$$

descreve a média do operador momento \mathcal{P}_j ao longo do tempo.

Uma outra expressão similar pode ser obtida (usando a propriedade 1) da última seção) da seguinte maneira:

$$\langle \psi, \mathcal{P}_j \psi \rangle = \langle \widehat{\psi}, \widehat{\mathcal{P}_j(\psi)} \rangle = \langle \widehat{\psi}, p_j \widehat{\psi} \rangle = \int p_j |\widehat{\psi}(p)|^2 dp,$$

ou, unidimensional: $\langle \psi, \mathcal{P} \psi \rangle = \langle \widehat{\psi}, \widehat{\mathcal{P}(\psi)} \rangle = \langle \widehat{\psi}, p \widehat{\psi} \rangle = \int p |\widehat{\psi}(p)|^2 dp.$

De forma consistente com isto, se soubermos qual é exatamente a onda que descreve a posição espacial via $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, podemos, tomar sua Transformada de Fourier $\widehat{\psi} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, e assim, obter a densidade do vetor momento p que seria dada por $|\widehat{\psi}(p)|^2$.

Neste sentido, no caso n -dimensional se sabemos qual é exatamente a distribuição da posição ψ_t , podemos, tomar sua Transformada de Fourier $\hat{\psi}_t$, e assim, obter a distribuição da j -ésima componente do vetor momento p no tempo t , ou seja, de $\mathcal{P}_j(p)$ no tempo t .

O momento da partícula é uma grandeza que pode ser medida através de experimentos físicos (Compton scattering).

POSTULADO 7. *A probabilidade de que o momento p da partícula no tempo t esteja no conjunto C é dada por*

$$\int_C |\hat{\psi}(t, p)|^2 dp,$$

onde $\psi(t, x) = \psi_t(x)$ denota o estado que descreve a probabilidade (via $|\psi_t(x)|^2$) de posição de x no tempo t .

$$\text{Lembre que } \hat{\psi}(p) = (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int e^{-\frac{i\langle p, x \rangle}{\hbar}} \psi(x) dx.$$

Afirmamos que se uma partícula quântica tem sua posição x descrita pela probabilidade associada a onda $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, então, sua transformada de Fourier $\hat{\psi} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ descreve a probabilidade do seu momento. Ou seja, a informação do momento p está contida na informação da posição espacial x .

Dado o operador Hamiltoniano \mathbf{H} e uma condição inicial ψ_0 se obtém via equação de Schrödinger a evolução $\psi_t = e^{-t i \frac{1}{\hbar} \mathbf{H}} \psi_0$.

Considere agora $\hat{\psi}_0$ a Transformada de Fourier de ψ_0 . Esta define via $|\hat{\psi}_0(p)|^2$ a densidade do momento p no instante $t = 0$.

Observe o seguinte fato fundamental: vamos considerar

$$\hat{\psi}(p) = (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int e^{-\frac{i\langle p, x \rangle}{\hbar}} \psi(x) dx$$

para uma função ψ tal que $\int |\psi|^2 dx = 1$. Não vamos considerar a integral $(2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int e^{-\frac{i\langle p, x \rangle}{\hbar}} |\psi(x)|^2 dx$

Se supusermos que a partícula quântica está posicionada no ponto x_0 e que não tem dispersão, então, devemos considerar que sua "densidade" é a delta Dirac em x_0 . Como é explicado com detalhes na

última seção, no sentido de distribuições, a transformada de Fourier da delta Dirac em x_0 é a função $p \rightarrow e^{-\frac{ipx_0}{\hbar}}$. Esta função não está em $\mathcal{L}^2(dp)$. Desta forma, o momento não tem uma densidade bem definida. Mas, heurísticamente, se pode pensar que o momento associado ao "estado" delta de Dirac em x_0 é descrito por $p \rightarrow e^{-i\frac{\hbar}{p}x_0}$.

Note que $|e^{-i\frac{\hbar}{p}x_0}|^2 = 1$ e isto "poderia" ser entendido como a descrição estatística mais "esparramada" possível do momento p . Esta manifestação radical do momento está associada - via transformada de Fourier no sentido de distribuição - a mais concentrada das possíveis descrições da posição (a delta Dirac em x_0). Esta é uma versão extrema do princípio da incerteza (ver seção 1.8).

Na seção 1.13 mostramos também que no sentido de distribuição a transformada de Fourier de $x \rightarrow e^{-i\frac{\hbar}{p_0}x}$ é a delta Dirac em p_0 . Assim, para o "estado" dado por $x \rightarrow e^{-i\frac{\hbar}{p_0}x}$ obtemos que o momento associado é descrito pela delta Dirac em p_0 .

Suponha que $\int x|f(x)|^2 dx = 0 = \int p^2|\hat{f}(p)|^2 dp$, ou seja, a média da posição e do momento da partícula descrita pelo estado f é zero. A seguinte relação entre uma função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ e sua transformada de Fourier \hat{f} é uma manifestação do assim chamado Princípio da Incerteza de Heisenberg que será abordado na seção 1.8:

$$\int x^2|f(x)|^2 dx \int p^2|\hat{f}(p)|^2 dp \geq \frac{\hbar}{4} \left(\int |f(x)|^2 dx \right)^2.$$

Vamos ver agora que via a Transformada de Fourier podemos quantizar distintas funções clássicas $g(p)$, $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

Por exemplo, qual operador A vai corresponder em Mecânica Quântica a $g(p) = g(p_1, p_2, p_3) = \frac{\|p\|^2}{2m} + 3p_2^2 p_3$? Isto será útil se quisermos considerar, por exemplo, a versão quântica de um Hamiltoniano da forma, $H(x, p) = \frac{\|p\|^2}{2m} + 3p_2^2 p_3 + V(x)$.

Em outras palavras, dado $g(p) = g(p_1, p_2, \dots, p_n)$, gostaríamos de obter de uma forma bem estruturada e coerente $g(\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2, \dots, \mathcal{P}_n)$.

De uma forma ingênua poderíamos associar a $g(p_1, p_2, p_3) = 3p_2^2 p_3$ o operador $3\mathcal{P}_2^2\mathcal{P}_3$. Mas cabe a pergunta: porque não: $3\mathcal{P}_2\mathcal{P}_3\mathcal{P}_2$.

Bem, neste caso isto não se torna um problema porque \mathcal{P}_2 e \mathcal{P}_3 comutam (lembre que $[\mathcal{P}_2, \mathcal{P}_3] = 0$).

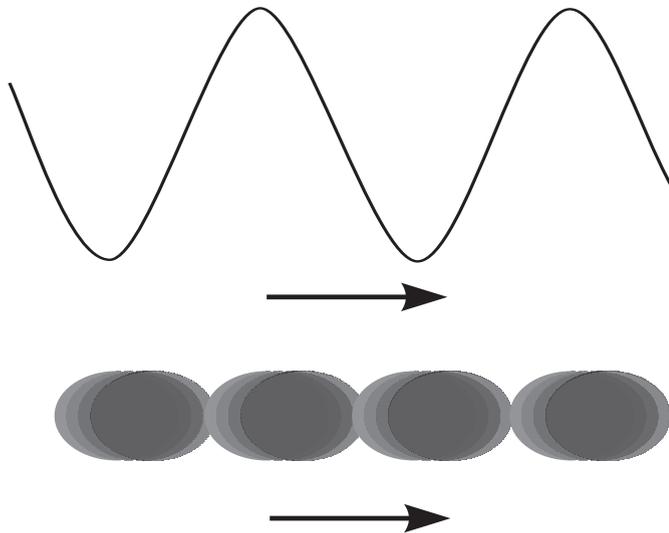


Figura 6.1: Um estado ψ tal que é quase $|\psi(x)|^2 = \cos(\alpha x)$. No tom mais escuro as regiões de maior probabilidade de encontrar a partícula na posição x (Wikipedia).

Problemas poderiam ocorrer se desejássemos quantizar $g(x, p) = x_3^2 p_3 = x_3 p_3 x_3$, isto porque, \mathcal{X}_3 e \mathcal{P}_3 não comutam. Mais tarde iremos tratar deste assunto quando analisarmos a quantização de Weyl na seção 2.16. de [189]. Fica transparente aqui uma diferença fundamental entre o cenário clássico e quântico. O produto de funções é comutativo mas o produto (composta) de operadores não.

Via transformada de Fourier vamos poder introduzir uma quantização que descreve de forma apropriada o fenômeno observado na Natureza. Dado $g(p) = g(p_1, p_2, \dots, p_n)$ em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dp)$ (satisfazendo certas condições técnicas) e ψ desejamos definir

$$g(\mathcal{P}) = g(\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2, \dots, \mathcal{P}_n)(\psi).$$

Note que para isto basta dizer quem é a função

$$\mathcal{F}(g(\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2, \dots, \mathcal{P}_n)(\psi)) = \widehat{g(\mathcal{P})},$$

pois,

$$\mathcal{F}^* (\mathcal{F} (g(\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2, \dots, \mathcal{P}_n)(\psi))) = g(\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2, \dots, \mathcal{P}_n)(\psi).$$

Definimos

$$g(\widehat{\mathcal{P}})(\psi)(p) = g(p) \widehat{\psi}(p).$$

Note que este procedimento é consistente com o fato que dado $g(p) = g(p_1, p_2, p_3) = p_2$, temos que $\mathcal{P}_2(\psi)$ satisfaz

$$\widehat{\mathcal{P}_2(\psi)}(p) = p_2 \widehat{\psi}(p).$$

Ainda, a partir do descrito acima, se $g(p) = g(p_1, p_2, p_3) = p_3^2$, então $\widehat{\mathcal{P}_3^2(\psi)} = p_3^2 \widehat{\psi}(p)$.

Logo, $\mathcal{P}_3^2(\psi)(x_1, x_2, x_3) = \mathcal{F}^*(p_3^2 \widehat{\psi}(p_1, p_2, p_3))(x_1, x_2, x_3)$.

Em resumo, para determinar $g(\mathcal{P})$ devemos descrever sua ação sobre cada ψ . Ora, dado ψ , se soubermos quem é $g(\widehat{\mathcal{P}})(\psi)$, obtemos $g(\mathcal{P})(\psi) = \mathcal{F}^*(\widehat{\mathcal{P}}(\psi))$. Vamos nos valer da expressão $g(\widehat{\mathcal{P}})(\psi)(p) = g(p) \widehat{\psi}(p)$.

Nosso objetivo final será encontrar uma expressão integral para o operador $e^{-i\frac{t}{\hbar}(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta)}$.

Antes disso vamos considerar um caso particular importante. É fácil ver que dado qualquer polinômio quadrático $g(p)$ nas variáveis p_1, p_2, \dots, p_n , o operador $g(\mathcal{P})$ é obtido mediante a substituição de p_i por \mathcal{P}_i , na expressão analítica de g . Da mesma forma, por limite, uma série de potências em $p_1^2, p_2^2, p_3^2, \dots, p_n^2$ pode ser aplicado a \mathcal{P} e o resultado é obtido apenas substituindo os $p_1^2, p_2^2, p_3^2, \dots, p_n^2$, respectivamente por, por $\mathcal{P}_1^2, \mathcal{P}_2^2, \mathcal{P}_3^2, \dots, \mathcal{P}_n^2$.

Vamos considerar agora um caso particular importante. É fácil ver que dado qualquer polinômio quadrático $g(p)$ nas variáveis p_1, p_2, \dots, p_n , o operador $g(\mathcal{P})$ é obtido mediante a substituição de p_i por \mathcal{P}_i , na expressão analítica de g . Da mesma forma, por limite, uma série de potências em $p_1^2, p_2^2, p_3^2, \dots, p_n^2$ pode ser aplicado a \mathcal{P} e o resultado é obtido apenas substituindo os $p_1^2, p_2^2, p_3^2, \dots, p_n^2$, respectivamente por, por $\mathcal{P}_1^2, \mathcal{P}_2^2, \mathcal{P}_3^2, \dots, \mathcal{P}_n^2$.

Note então que

$$\widehat{\mathcal{P}^2(\psi)} = -\hbar^2 \widehat{\Delta(\psi)} = (p_1^2 + \dots + p_n^2) \widehat{\psi}.$$

Finalmente, observamos que se $g(p)$ for uma função que toma apenas valores reais, então $g(\mathcal{P})$ é autoadjunto.

De fato,

$$\begin{aligned} \langle g(\mathcal{P})(\psi), \phi \rangle &= \langle \widehat{g(\mathcal{P})(\psi)}, \hat{\phi} \rangle = \\ &= \langle g(p)(\hat{\psi}), \hat{\phi} \rangle = g(p) \langle \hat{\psi}, \hat{\phi} \rangle = g(p) \langle \psi, \phi \rangle. \end{aligned}$$

De forma análoga, temos

$$\langle \psi, g(\mathcal{P})(\phi) \rangle = \overline{g(p)} \langle \psi, \phi \rangle = g(p) \langle \psi, \phi \rangle.$$

O fato não trivial é que se pode considerar acima funções g não analíticas. No caso de p unidimensional, por exemplo, $g(p) = I_{(a,b)}(p)$, onde (a, b) é um intervalo.

Assim, $I_{(a,b)}(\mathcal{P})(\psi)(x) = \mathcal{F}^*(I_{(a,b)}(p) \hat{\psi}(p))$.

Desta forma, via transformada de Fourier, podemos quantizar qualquer Hamiltoniano da forma $H(x, p) = g(p) + V(x)$, $V: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, onde g pode ser bastante geral (nem precisa ser diferenciável).

Desejamos descrever agora a evolução temporal da equação de Schrodinger via uma **um operador integral** no caso do potencial nulo. Mais exatamente, vamos mostrar que dada uma condição inicial ψ então para qualquer $t \geq 0$

$$\psi_t(x) = (e^{-i\frac{t}{\hbar}(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta)} \psi)(x) = \left(\frac{2\pi i \hbar t}{m}\right)^{-n/2} \int e^{\frac{im|x-y|^2}{2\hbar t}} \psi(y) dy.$$

Primeiro no que foi descrito acima considere

$$g(p) = e^{-\frac{a\hbar^2(p_1^2 + \dots + p_n^2)}{2}},$$

onde a parte real do número $a \in \mathbb{C}$ é maior que zero.

Neste caso, como $\mathcal{P}^2 = -\hbar^2 \Delta$, temos

$$\widehat{g(\mathcal{P})(\psi)}(p) = e^{-\frac{a\hbar^2(p_1^2 + \dots + p_n^2)}{2}} \hat{\psi}(p).$$

Ainda, como $\mathcal{P}^2 = -\hbar^2 \Delta$, obtemos $e^{a\mathcal{P}}(\psi)$, e assim podemos aplicar \mathcal{F}^* dos dois lados da expressão acima para obter

$$(e^{a\frac{\hbar^2}{2}\Delta} \psi)(x) = (2\pi a \hbar^2)^{-n/2} \int e^{-\frac{|x-y|^2}{2a\hbar^2}} \psi(y) dy.$$

Acima usamos o fato que $\mathcal{F}^*(\phi_1 \phi_2)(x) = (2\pi\hbar)^{-n/2} [\mathcal{F}^*(\phi_2) * \mathcal{F}^*(\phi_1)]$ e que temos conhecimento da transformada de Fourier (e sua inversa) da densidade Gaussiana.

Assim a associação $\psi \rightarrow (e^{a \frac{\hbar^2}{2} \Delta} \psi)$ pode ser obtida via integração. Destacamos aqui o fato que $e^{a \frac{\hbar^2}{2} \Delta} \psi$ só faria sentido para ψ que fosse diferenciável. No entanto, a expressão integral que envolve o kernel acima pode ser aplicado em funções mais gerais e que estão em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)_{\mathbb{C}}$.

No caso em que $\text{Re } a = 0$ se pode fazer uma estimativa similar tomando um procedimento limite via a propriedade obtida para $\text{Re } a > 0$.

Considerando acima $a = \frac{it}{m\hbar}$ se obtém que

$$\psi_t(x) = (e^{-i\frac{t}{\hbar}(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta)} \psi)(x) = \left(\frac{2\pi i \hbar t}{m}\right)^{-n/2} \int e^{+i\frac{m|x-y|^2}{2\hbar t}} \psi(y) dy.$$

Observe que acima usamos o fato que $\sqrt{i} = (1+i)\frac{\sqrt{2}}{2}$.

Como $\int |\psi_t|^2 dx < \infty$ decorre da fórmula acima que para qualquer paralelepipedo $K = [a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \times \dots \times [a_n, b_n]$, $a_j, b_j, j = 1, 2, \dots, n$, finitos fixados em \mathbb{R}^n , temos que

$$\lim_{t \rightarrow 0} \int_K |\psi_t(x)|^2 dx = 0.$$

Isto está de acordo com nossa intuição: a partícula quântica tem, a longo prazo, probabilidade nula de ser encontrada numa parte finita do \mathbb{R}^n .

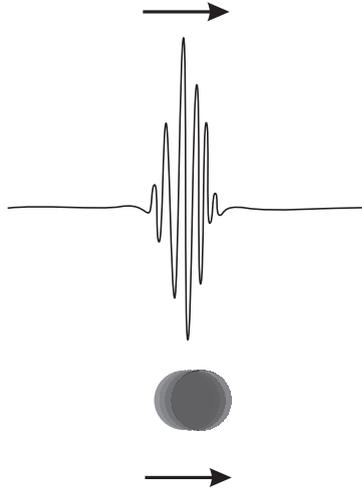


Figura 6.2: A transformada de Fourier $\hat{\psi}(p)$ de um estado ψ tal que aproximadamente vale $|\psi(x)|^2 = \cos(\alpha x)$. A região mais escura descreve a área de maior probabilidade de encontrar o momento p do estado ψ (Wikipedia)

Se considerarmos o kernel

$$K_t(x, y) = \left(\frac{2\pi i \hbar t}{m}\right)^{-n/2} e^{\frac{im|x-y|^2}{2\hbar t}},$$

$t \geq 0$, podemos definir o operador integral associado

$$\mathcal{K}_t(\psi)(x) = \int K_t(x, y)\psi(y) dy.$$

O kernel acima, embora tome valores complexos, lembra o kernel da equação do calor.

Dado Hamiltoniano clássico $H(x, p) = \frac{p^2}{2m}$, e, sua quantização $\mathbf{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$, e uma condição inicial ψ_0 , a equação de evolução satisfaz, para todo $t \geq 0$,

$$\psi_t(x) = e^{t \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H}_0}(\psi_0) = \mathcal{K}_t(\psi_0).$$

Assim, obtivemos uma expressão via Operador Integral (usando \mathcal{K}_t) que permite descrever a evolução temporal do Sistema Quântico quando não existe força externa ($V = 0$, ou, constante).

Operadores integrais são sempre mais fáceis de lidar do que operadores que envolvem a derivada, ou seja, os operadores diferenciais. O kernel \mathcal{K}_t é uma espécie de versão quântica da distribuição Gaussiana.

Suponhamos que a posição inicial da partícula seja em x_0 , ou seja, $\psi_0 = \delta_{x_0}$.

A evolução então seria dada por

$$\psi_t(x) = e^{t \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H}_0}(\psi_0)(x) = \left(\frac{2\pi i \hbar t}{m}\right)^{-n/2} e^{-\frac{im|x-x_0|^2}{2\hbar t}}.$$

Neste caso, para cada t fixo, $|\psi_t(x)|^2$ é constante, e, não define assim um elemento em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dp)$. Isto é esperado em função do Princípio da Incerteza como veremos em breve na seção 1.7.

Se a posição estiver muito localizada o momento fica, estatisticamente falando, muito indefinido.

Existem expressões parecidas (mas não iguais) as descritas acima para a equação do calor (ver [39]). Mais tarde na seção 2.11 de [189] vamos fazer um paralelo da Mecânica Quântica com o Movimento Browniano e difusões.

Note que formalmente, para p_0 fixo, a função $x \rightarrow e^{-\frac{i\langle x, p_0 \rangle}{\hbar}}$ é autofunção para o operador $\mathbf{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$. Esta função se chama de onda plana associada a p_0 . O problema é que não está em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$. Como a transformada de Fourier de $x \rightarrow e^{-\frac{i\langle x, p_0 \rangle}{\hbar}}$, onde p_0 esta fixo, no sentido de distribuições, é a delta Dirac em p_0 (conforme a última seção), podemos pensar que esta função (distribuição) $e^{-\frac{i\langle x, p_0 \rangle}{\hbar}}$ descreve um estado na variável x em que não há dispersão do momento p . A formalização da afirmação acima requer o uso da Teoria das Distribuições; isto será analisado de forma mais precisa em uma futura seção ao fim do texto.

Note que \mathcal{V} é um operador integral (no sentido degenerado de tal forma que seu kernel integral é $K(x, y) = V(x)\delta_y(dx)$). Como, infelizmente, \mathcal{V} e \mathcal{P}^2 não comutam, não se obtém diretamente um resultado desta natureza para o exponencial de \mathbf{H} . Lembre que, conforme seção 0, a composição de operadores integrais é um operador integral.

Como veremos na seção 2.9 de [189], muitas vezes, também o operador $e^{t \frac{1}{\hbar} \mathbf{H}}$ pode ser expresso via operador integral.

Suponha que $e^{t \frac{1}{\hbar} \mathbf{H}}$, para todo t fixo, tenha um kernel integral da forma $K(t, x, y)$, $t \geq 0, x, y \in \mathbb{R}^n$. O $K_t(x, y)$ é denominado de núcleo propagador (que leva x no tempo $t = 0$ a y no tempo t). Sob estas condições temos:

Definição 6.1. Dado Hamiltoniano clássico $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, e, sua quantização \mathbf{H} , a equação de evolução satisfaz, para todo $t \geq 0$,

$$\psi_t(x) = e^{t \frac{1}{\hbar} \mathbf{H}}(\psi_0) = \mathcal{K}_t(\psi_0).$$

Nem sempre é possível encontrar tal $K(t, x, y)$.

Fazendo uma analogia da ação do propagador $e^{t \frac{1}{\hbar} \mathbf{H}}$ com a Teoria dos Processos Estocásticos (conforme [159] e [160]) podemos dizer que $K_t(x, y)$ é tal que $|K_t(x, y)|^2$ faz o papel da probabilidade de passagem da partícula que esta na posição x no tempo 0 até a posição y no tempo t (ver seção 2.11 de [189]).

Via integrais de caminhos se pode mostrar (veja seção 2.10 em [189]) que, no caso do oscilador harmônico, $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$, o propagador que leva o ponto x (no tempo $t = 0$) ao ponto y no tempo t é dado por

$$K_t(x, y) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \text{sen}(\omega t)} \right)^{1/2} e^{\frac{i m \omega}{2 \hbar \text{sen}(\omega t)} [(x^2 + y^2) \cos(\omega t) - 2xy]}.$$

Capítulo 7

Exemplos

Referimos o leitor a [22] para uma série de exemplos e simulações computacionais envolvendo os tópicos aqui analisados.

1) Considere o Hamiltoniano $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ do oscilador harmônico.

A equação para $\psi(x)$ na equação de Schrödinger para os autovalores da quantização \mathbf{H} de tal H se torna

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi(x) = \lambda \psi(x).$$

Estamos considerando aqui o operador $\mathbf{H} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \mathcal{V}$ definido no espaço de Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})(dx)$, que é o fecho do conjunto $D(\mathbf{H}) = \{\psi : (-\infty, \infty) \rightarrow \mathbb{C} \text{ de classe } C^2\} \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R})(dx)$.

Via separação de variáveis obtemos que a solução da equação de autovalor determina $\lambda_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$, $n \in \mathbb{N}$, e ainda que (ver exemplo 4 seção 3.6 em [39]) a autofunção correspondente é

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar}\right)^{\frac{1}{4}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x\right) e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}},$$

onde H_n é o n -ésimo polinômio de Hermite.

Por exemplo, vale que $H_0(x) = 1$ and $H_1(x) = cx$, onde c é uma constante.

O ground state ψ_0 , estado de energia mínima $E_0 = \frac{1}{2} \hbar w$, é descrito por

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m w}{\pi \hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m w x^2}{2 \hbar}}.$$

Assim, $|\psi_0|^2$ vai determinar uma densidade Gaussiana com variância $a = \sqrt{\frac{\hbar}{2 m w}}$.

Esta coleção de φ_n , $n \in \mathbb{N}$, determina um conjunto ortonormal completo para o operador

$$\mathbf{H} = \frac{\mathcal{P}}{2 m} + \frac{1}{2} m w^2 \mathcal{X}^2.$$

Note que para o caso do Hamiltoniano clássico $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m w^2 x^2}{2}$ todos os valores reais não negativos podem ser atingidos como possíveis níveis de energia. No caso quântico somente os valores da forma $\lambda_n = (n + \frac{1}{2}) w \hbar$, $n \in \mathbb{N}$, podem ser atingidos como possíveis valores de energia.

Note também que para qualquer n e para qualquer intervalo (a, b) , temos que

$$\int_a^b |\varphi_n(x)|^2 dx > 0.$$

Assim, existe probabilidade positiva de encontrar a partícula no estado φ_n em qualquer parte da reta real. A projeção em x de cada nível de energia de tal H é sempre um intervalo limitado. Desta forma o comportamento da partícula quântica no nível de energia λ_n é bastante distinto da sua análoga clássica. Este fenômeno é denominado de tunelamento.

Nas figuras 7.4, 7.5 e 7.6 mostramos do lado esquerdo a autofunção e do lado direito a autofunção ao quadrado, no caso correspondente a $n = 0$, $n = 1$, e $n = 2$. Ou seja, o gráfico das primeiras três autofunções do oscilador harmônico quântico.

Note que no oscilador harmônico o ground state é da forma $\phi_0 = A e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$, onde $\alpha = \frac{2 \hbar}{m w}$. Assim, quando a massa tende a infinito temos que a variância (que é da ordem de $\sqrt{\alpha}$) vai a zero e assim a distribuição probabilística da partícula (via função de onda) converge a delta Dirac centrada em 0. Esta é uma descrição bem sucedida da passagem do mundo quântico ao clássico.

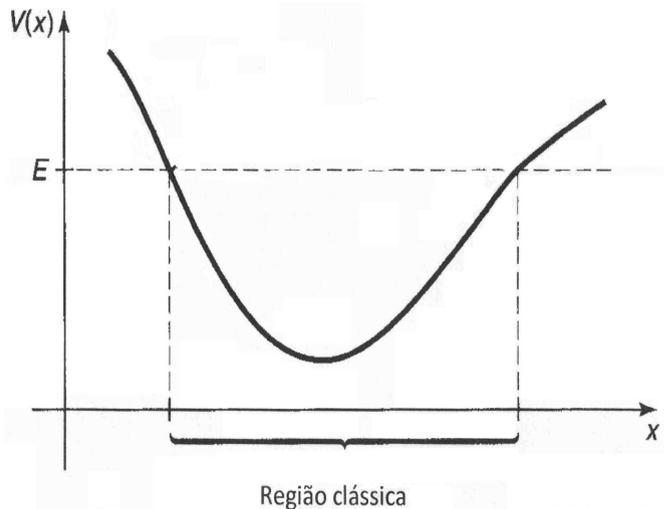


Figura 7.1: Na Mecânica Clássica num certo nível de energia fixo E os valores possíveis de x estão somente na região clássica exibida pela figura. Na Mecânica Quântica existe probabilidade positiva de encontrar a partícula fora da região clássica (tunelamento)

Tomando w tal que $w^2 = \frac{1}{m}$ no Hamiltoniano $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m w^2 x^2}{2}$ obtemos o Hamiltoniano $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{x^2}{2}$.

Neste caso a massa não interfere no potencial $V(x) = \frac{x^2}{2}$. Isto nos parece mais razoável do ponto de vista do fenômeno físico.

Neste caso os autovalores são $\lambda_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \frac{1}{\sqrt{m}}$. Note que $\lambda_{n+1} - \lambda_n = \hbar \frac{1}{\sqrt{m}}$.

Observamos que a medida que a massa m cresce o espaçamento entre os níveis de energia diminui. Neste sentido o limite semiclássico seria considerar $m \rightarrow \infty$ e desta forma o espaçamento tenderia a zero.

O que queremos dizer com isto é o seguinte: fixe (x_0, p_0) e para cada massa m considere o correspondente Hamiltoniano $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{x^2}{2}$; considere ainda $n \in \mathbb{N}$ e o nível de energia clássico que passa por (x_0, p_0) com energia $E_0 = H(x_0, p_0) = \lambda_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \frac{1}{\sqrt{m}}$.

O espaçamento entre estes níveis de energia tende a zero com $m \rightarrow \infty$ e assim no cenário clássico se tem a ilusão de que os níveis de energia variam num contínuo.

O tempo de ocupação assintótica da partícula clássica num nível de energia E (próxima a um ponto de mínimo quadrático do potencial V , que supomos aqui ser o ponto 0 na reta real) é definido da seguinte forma (para mais detalhes referimos a seção 3.7 em [184]): vamos supor que (x, p) está em \mathbb{R}^2 para simplificar a descrição. Fixada uma condição inicial (x_0, p_0) , considere $(x(t), p(t))$ a correspondente trajetória do campo de vetores Hamiltoniano definido pela equação de Hamilton para $H(x, p)$. Pelo teorema de conservação de energia existe E tal que $H(x(t), p(t)) = E$ para todo t .

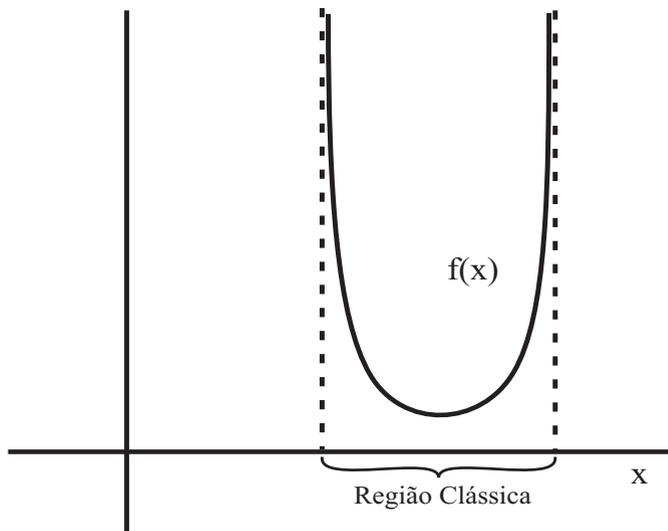


Figura 7.2: densidade $f(x)$ do tempo de ocupação assintótico.

Fixada uma trajetória periódica $(x(t), p(t))$ de período $T_E > 0$, seja γ a órbita do campo Hamiltoniano, ou seja, γ é o conjunto dos pontos percorridos pela trajetória $(x(t), p(t))$.

Fixado o nível de energia E existe um intervalo $[a_E, b_E]$ que é a projeção de $\gamma = \gamma_E$ na coordenada x , ou seja,

$$[a_E, b_E] = \{x(t) \mid t \in \mathbb{R}, (x(t), p(t)) \in \gamma_E\}.$$

Fixado um intervalo $[a, b]$ contido em a_E, b_E e um tempo T , considere

$$G[T, a, b] = \{t \in \mathbb{R}, T \geq t \geq 0, \text{ tais que } x(t) \in [a, b] (x(t), p(t)) \in \gamma_E\}.$$

O conjunto $G[T, a, b]$ é uma união de intervalos disjuntos cuja soma total de comprimentos será denotada por $l(T, a, b)$.

Definição 7.1. Se γ_E é uma órbita periódica de período $T_E > 0$ do campo Hamiltoniano H , obtida a partir de uma condição inicial (x_0, p_0) , dizemos que

$$\hat{o}([a, b]) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{l(T, a, b)}{T} \leq 1$$

é o tempo de ocupação assintótico do intervalo $[a, b]$.

Assim, o tempo de ocupação $\hat{o}([a, b])$ do intervalo $[a, b]$ é sempre um número real entre 0 e 1. Ele fornece o tempo médio que a projeção da trajetória $(x(t), p(t))$ permanece em $[a, b]$. Em princípio este valor deveria depender de (x_0, p_0) , mas no caso do presente exemplo, tal não acontece [184].

Pode-se mostrar que \hat{o} define uma probabilidade sobre o intervalo $[a_E, b_E]$. Usando coordenadas ação-ângulo se pode obter uma densidade $f = f_E$, tal que, para todo intervalo $[a, b]$ vale

$$\hat{o}([a, b]) = \int_a^b f(x) dx.$$

Observe que é natural que o tempo médio de estadia nas regiões extremas da região clássica (perto de onde a velocidade é zero) é mais alto.

Denominamos $f : [a_E, b_E] \rightarrow \mathbb{R}$ a *densidade do tempo de ocupação assintótica* do nível de energia E .

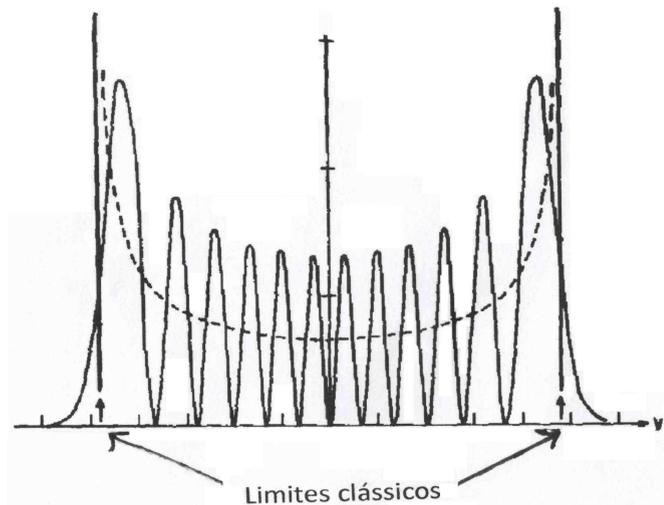


Figura 7.3: A linha pontilhada descreve o tempo de ocupação assintótica da partícula no nível de energia E segundo a Mecânica Clássica. A linha cheia descreve a densidade $|\psi|^2$ associada a um estado ψ que se encontra neste mesmo nível de energia $E = E_{20} = (20 + 1/2) w \hbar$. Note que existe uma probabilidade positiva de se encontrar a partícula fora da região clássica. Isto descreve o fenômeno do tunelamento.

Vamos agora retornar ao cenário quântico.

Denotamos por α_0 a constante $(\frac{\hbar}{m w})^{1/2}$ e esta pode ser encarada como uma unidade de medição normalizada. Vamos fazer uma mudança de escala e denotar $s = x/\alpha_0$.

No caso do nível de energia $E_n = \lambda_n = (n + 1/2) w \hbar$ a densidade do tempo de ocupação assintótica em s está confinada a região clássica $[-(2n + 1)^{1/2}, (2n + 1)^{1/2}]$.

De fato, se

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{m w^2 x^2}{2} = (n + 1/2) w \hbar,$$

os extremos ocorrem para $p = 0$. Assim, segue a afirmação acima.

Ainda, se pode calcular a densidade associada

$$f(s) = \frac{1}{\pi\sqrt{2n+1-s^2}}.$$

Referimos o leitor ao exercício 1 da seção 3.7 [184] para a ideia da prova desta afirmação.

Seria natural, para um certa massa m fixada, comparar a probabilidade da função de onda estacionária associada a um nível de energia $E_n = \lambda_n = (n + \frac{1}{2}) w \hbar$ do oscilador harmônico quântico e a correspondente densidade do tempo de ocupação assintótico (clássico) neste nível de energia. A figura 7.3 ilustra tal comparação. A curva pontilhada descreve a densidade do tempo de ocupação e a curva cheia o gráfico da densidade do estado no mesmo nível de energia $E_{20} = (20 + 1/2) w \hbar$.

Fixado o nível de energia E , existe uma probabilidade positiva de se encontrar a partícula fora da região clássica. Isto descreve o fenômeno do assim chamado *tunelamento*.

Referimos o leitor a seção 4.2.2 do capítulo 4 de

<http://www.instructioneducation.info/inhaltquant.html>

para uma descrição com muitas ilustrações e figuras do que consideramos acima.

2) O segundo exemplo considera uma partícula que pode se mover livremente no intervalo $[0, a]$, $a > 0$.

Sendo assim, como não existem forças externas podemos supor que V é constante igual a zero.

A equação para $\psi(x)$ que é autofunção de \mathbf{H} se torna

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \lambda \psi(x).$$

Como a partícula quântica deve estar confinada ao intervalo $[0, a]$ é "natural" (pelo menos para quem não está familiarizado com o cenário quântico) considerar apenas ψ tais que $\psi(0) = 0 = \psi(a)$. Na verdade estamos pensando que no sistema clássico associado a partícula colide com os extremos e é jogada de volta para dentro do intervalo.

É importante destacar que estamos considerando aqui o operador $\frac{d^2}{dx^2}$ definido no espaço de Hilbert \mathcal{H} que é o fecho em $\mathcal{L}^2([0, a])(dx)$ de $\{\psi : (0, a) \rightarrow \mathbb{C}$ de classe C^2 tal que $\psi(0) = 0 = \psi(a)\}$.

A função ψ constante igual a zero não nos interessa.

Uma vez encontrada a ψ então, a solução ao longo do tempo seria $\psi_t(x) = e^{-i\frac{t}{\hbar}\lambda} \psi(x)$.

A solução geral da equação diferencial de segunda ordem acima é

$$A \cosh(\sqrt{2m|\lambda|\frac{x}{\hbar}}) + B \sinh(\sqrt{2m|\lambda|\frac{x}{\hbar}}), \text{ se } \lambda < 0$$

$$A + Bx, \text{ se } \lambda = 0,$$

e

$$A \cos(\sqrt{2m\lambda\frac{x}{\hbar}}) + B \text{sen}(\sqrt{2m\lambda\frac{x}{\hbar}}), \text{ se } \lambda > 0,$$

onde A, B são constantes reais.

A condição $\psi(0) = 0$ força A a ser nulo. Se $\lambda \leq 0$, então B tem que se anular, porque $f(a) = 0$.

Se $\lambda > 0$, obtemos $\psi = B \text{sen}(\sqrt{2m\lambda\frac{x}{\hbar}})$. As condições de fronteira fazem com que λ deve ser necessariamente da forma $\sqrt{2m\lambda\frac{a}{\hbar}} = n\pi$, para algum n natural.

Desta maneira obtemos que os autovalores são da forma

$$\lambda_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, \quad n \in \mathbb{N}$$

As autofunções φ_n , $n \in \mathbb{N}$, correspondentes, já normalizadas, são

$$\varphi_n(x) = \frac{\text{sen}(\sqrt{2m\lambda_n\frac{x}{\hbar}})}{|\text{sen}(\sqrt{2m\lambda_n\frac{1}{\hbar}}(\cdot))|_2} = \frac{\text{sen}(\sqrt{2m\lambda_n\frac{x}{\hbar}})}{\sqrt{\frac{\pi n \hbar}{2\sqrt{2m\lambda_n}}}} = \frac{\text{sen}(\sqrt{2m\lambda_n\frac{x}{\hbar}})}{\sqrt{a/2}}.$$

Note que esta coleção define um conjunto ortonormal completo no espaço de Hilbert \mathcal{H} em consideração.

Os λ_n correspondem aos possíveis níveis de energia do sistema

Desta forma se o estado se encontra no nível de energia λ_3 , a probabilidade de encontrá-la na posição x entre $[c, d] \subset [0, a]$ é dada por

$$\int_c^d |\varphi_3(x)|^2 dx = \int_c^d \frac{|\text{sen}(\sqrt{2m\lambda_3\frac{x}{\hbar}})|^2}{\sqrt{a/2}} dx.$$

Na figura 8.1 mostramos o gráfico das três primeiras autofunções ao quadrado no caso de presente exemplo.

O valor esperado de \mathcal{X} será

$$E(\mathcal{X}) = \int_0^a x |\varphi_3(x)|^2 dx.$$

A solução geral da equação de Schrödinger será

$$\psi_t(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n e^{-i\frac{t}{\hbar}\lambda_n} \varphi_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n e^{-i\frac{t}{\hbar}\lambda_n} \text{sen}\left(\sqrt{2m\lambda_n}\frac{x}{\hbar}\right) \frac{1}{\sqrt{a/2}},$$

onde α_n , $n \in \mathbb{N}$, são números complexos.

Por exemplo,

$$\psi_t(x) = (7+3i)e^{-i\frac{t}{\hbar}\lambda_2} \text{sen}\left(\sqrt{2m\lambda_2}\frac{x}{\hbar}\right) + (2-3i)e^{-i\frac{t}{\hbar}\lambda_5} \text{sen}\left(\sqrt{2m\lambda_5}\frac{x}{\hbar}\right)$$

é uma solução. Este estado vai permitir observar a partícula em níveis de energia λ_2 e λ_5 .

No caso geral, seja $V : [0, a] \rightarrow \mathbb{R}$ contínuo e considere o espaço de Hilbert $\mathcal{L}^2([0, a], dx)$ em que assumimos que $\psi(0) = 0 = \psi(a)$.

O estudo dos autovalores e autofunções associados a equação

$$\mathbf{H}(\varphi) = -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{d^2x} + V(x)\varphi(x) = \lambda\varphi(x)$$

faz parte do assim chamado problema de Sturm-Liouville. Referimos o leitor a [141] ou [175] para o estudo do espectro do operador Hamiltoniano \mathbf{H} neste caso.

3) O terceiro exemplo considera uma partícula que pode se mover livremente no círculo \mathbb{S}^1 , ou seja, em $[0, 2\pi)$, onde identificamos 0 e 2π .

Este problema é conceitualmente distinto do anterior. Aqui a partícula (que digamos se encontra um pouco a esquerda de 2π) poderia "passar" via o ponto 2π , de forma contínua para os pontos um pouco maiores que 0 (estamos no círculo). O caso anterior descreve uma partícula que ao chegar ao extremo direito a , "colide" e volta de forma contínua para dentro do intervalo $[0, a]$, e, em pontos próximos a a .

Não vamos assumir que $\psi(0) = 0 = \psi(2\pi)$ mas apenas que $\psi(0) = \psi(2\pi)$.

Sendo assim, como não existem forças externas podemos supor que V é constante igual a zero.

A equação para $\psi(x)$ a autofunção se torna

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \lambda \psi(x).$$

Como a partícula quântica deve estar confinada em \mathbb{S}^1 é "natural" considerar apenas os ψ tais que $\psi(0) = \psi(2\pi)$.

Estamos considerando aqui o operador $\frac{d^2}{dx^2}$ definido no espaço de Hilbert \mathcal{H} que é o fecho em $\mathcal{L}^2([0, 2\pi])(dx)$ de $\{\psi : [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{C}$ de classe C^2 tal que $\psi(0) = \psi(2\pi)\}$.

Da mesma maneira como procedemos no exemplo anterior obtemos que os autovalores, neste caso, são da forma

$$\lambda_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m 2}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

As autofunções $\varphi_n, \phi_n, n \in \mathbb{N}$, correspondentes, já normalizadas, são

$$\varphi_n(x) = \frac{\text{sen}(\sqrt{2 m \lambda_n} \frac{x}{\hbar})}{|\text{sen}(\sqrt{2 m \lambda_n} \frac{1}{\hbar} (\cdot))|_2},$$

e

$$\phi_n(x) = \frac{\text{cos}(\sqrt{2 m \lambda_n} \frac{x}{\hbar})}{|\text{cos}(\sqrt{2 m \lambda_n} \frac{1}{\hbar} (\cdot))|_2}.$$

Note que esta coleção define um conjunto ortonormal completo no espaço de Hilbert \mathcal{H} em consideração.

Desta forma a solução geral da equação de Schrödinger será

$$\psi_t(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n e^{-i \frac{t}{\hbar} \lambda_n} \varphi_n(x) + \sum_{n=0}^{\infty} \beta_n e^{-i \frac{t}{\hbar} \lambda_n} \phi_n(x),$$

onde $\alpha_n, \beta_n, n \in \mathbb{N}$, são números complexos.

Conforme mencionamos (de acordo com a pagina 206 e Theorem 2.105 de [82] por exemplo) antes dado um potencial V em S^1 , ou seja,

$V : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ periódico (isto é: $V(0) = V(1)$), e de classe C^∞ , então existe um conjunto ortonormal completo de autofunções periódicas diferenciáveis $\varphi_n : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$, $n \in \mathbb{N}$ para \mathbf{H} . As φ_n são ortogonais em relação ao produto interno em $\mathcal{L}^2(dx)$, ou seja $\int \varphi_n \varphi_k dx = 0$, quando $n \neq k$. Uma prova deste resultado aparece em [276].

Não vamos assumir no espaço de Hilbert $\mathcal{L}^2(dx)$ que $\psi(0) = 0 = \psi(1)$ mas apenas que $\psi(0) = \psi(1)$.

O caso descrito acima é apenas um caso particular deste caso em que V é periódica mas qualquer.

Embora V seja um função limitada e os autovalores de \mathbf{H} atingem valores ilimitados.

Note ainda que φ_n satisfaz a equação diferencial ordinária de segunda ordem

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2 \varphi_n(x)}{dx^2} + V(x) \varphi_n(x) = \lambda_n \varphi_n(x),$$

onde V é de classe C^∞ . Assim, qualquer autofunção é de classe C^∞ .

Observe que só existe uma autofunção φ_n que é estritamente positiva. De fato se existissem duas autofunções positivas φ_n e φ_k , então $\int \varphi_n \varphi_k dx \neq 0$, o que seria contradição.

Caberia ainda a possibilidade de haver mais de uma autofunção associado ao menor autovalor. Vamos elucidar tal questão.

Seja λ_0 o menor autovalor. Na seção 2.3 de [189] se mostra que para qualquer autofunção ground state φ_0 minimiza

$$\lambda_0 = \int \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{d\psi}{dx}(x) \right|^2 + V(x) |\psi(x)|^2 dx,$$

entre os diversos ψ de norma 1.

O espaço natural para tratar tal problema é o das funções ψ de quadrado integrável tais que $\int \left| \frac{d\psi}{dx}(x) \right|^2 dx < \infty$. Este espaço é conhecido como o espaço de Sobolev $H_{0,1}$ (mais detalhes em [269] ou [34]).

Observe que qualquer autofunção φ_n não pode em um dado ponto y satisfazer simultaneamente $\varphi_n(y) = 0$ e $\varphi_n'(y) = 0$. Isto iria contrariar o teorema de existencia e unicidade pois a função constante igual a zero satisfaz a equação diferencial de segunda ordem e as duas condições.

Se houver alguma autofunção φ_0 que assume valores negativos e positivos então $|\varphi_0|$ também será minimizante da integral acima e assim a autofunção $|\varphi_0|$ atinge o valor 0 em algum ponto y . Como $|\varphi_0|$ é diferenciável então $|\varphi_0|'(y) = 0$. Isto como vimos no desenvolvimento acima isto não é possível.

Assim a autofunção que é estritamente positiva corresponde ao ground state.

Suponha que existam duas autofunções reais distintas f_1 e f_2 associadas ao menor autovalor λ_0 . Como $\int (f_1^2(x) - f_2^2(x)) dx = 0$, então existe ponto x_0 tal que $f_1^2(x_0) - f_2^2(x_0) = 0$. Disto segue que $f = f_1 - f_2$ é autofunção associado ao autovalor λ_0 e além disso $f(x_0) = 0$. Como isto não é possível concluímos que a multiplicidade do menor autovalor é 1.

O estudo do limite semiclássico do ground state em superfícies aparece por exemplo em [138].

A equação

$$\mathbf{H}(\varphi) = -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{d^2x} + V(x)\varphi(x) = \lambda\varphi(x).$$

e sua relação com a formula de Feynman-Kac aparece em [212] [252] e no capítulo 15 em em [160].

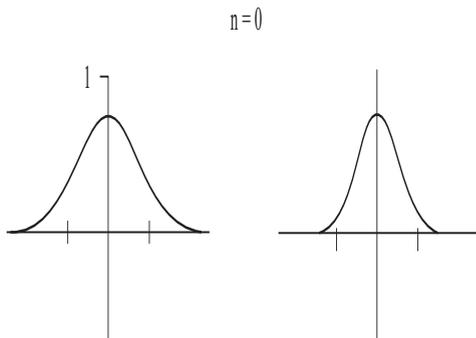


Figura 7.4: Seja ψ_0 o ground state do oscilador harmônico. A esquerda seu gráfico e a direita o gráfico de $|\psi_0|^2$

4) Seja $A(x) = (a_{ik}(x))$, $i, k = 1, 2, \dots, n$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, matriz simétrica real positiva definida indexada por $x \in B \subset \mathbb{R}^n$, que determina desta forma uma métrica Riemanniana no aberto B do plano \mathbb{R}^n , isto é, $|v|_x = \langle v, A(x)v \rangle$, onde $v \in \mathbb{R}^n$ é um vetor tangente com ponto base $x \in B$, e, \langle, \rangle é o produto interno canônico (ver seção 2 em [184]).

Isto é $\langle u, v \rangle_x = u A(x)v \in \mathbb{R}$, $u, v \in \mathbb{R}^n$, onde u é visto como vetor linha e v como vetor coluna.

As soluções da equação de Euler Lagrange para o Lagrangeano $L(x, v) = \frac{m}{2} |v|_x^2$ são geodésicas da métrica Riemanniana. Neste caso o potencial V é nulo.

No caso de um Lagrangeano L geral a equação de Euler-Lagrange é dado pelo sistema de e.d.o. de segunda ordem

$$\partial_{x_i} L(x(t), x'(t)) - \frac{d}{dt} \partial_{v_i} L(x(t), x'(t)) = 0,$$

$i = 1, 2, \dots, n$.

O correspondente operador Laplaciano é

$$\Delta F(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{1}{\sqrt{\det A(x)}} \sum_{k,i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sqrt{\det A(x)} a_{ki}(x) \frac{\partial F(x)}{\partial x_k} \right).$$

Referencias gerais sobre tópicos em Geometria Riemanniana podem ser encontrados em [44] e na seção 7 em [50]. O texto [165] cobre na seção II. 3 alguns aspectos gerais da quantização em variedades Riemannianas.

Se pode considerar mais geralmente uma métrica Riemanniana numa variedade diferenciável M que define em cada ponto $x \in M$ para cada vetor tangente v a M no ponto x um valor $|v|^2$ (ver [44]). As soluções da equação de Euler-Lagrange são as geodésicas da variedade Riemanniana (ver seção 2 em [184]). Existe uma maneira geral de definir o operador Laplaciano Δ a partir da métrica Riemanniana (ver [269]).

Dada uma função $V : M \rightarrow \mathbb{R}$ diferenciável se pode considerar o operador Hamiltoniano \mathbf{H}

$$f \rightarrow \mathbf{H}(f) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta f + V f.$$

Assim, para $\psi : \mathbb{R} \times M \rightarrow \mathbb{C}$ obtemos a correspondente equação de Schrodinger

$$\frac{d\psi}{dt} = \psi'(t) = \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H}(\psi(t)).$$

No caso da métrica hiperbólica (ver seção 5 chapter 8 in [269], section 2 em [184] ou [44]) temos que $B = \{(x, y) | y \geq 0\}$ é o semi-plano superior contido em \mathbb{R}^2 , e, para $(x, y) \in \mathbb{R}^2$

$$-\Delta F(x, y) = -y^2 \left(\frac{\partial^2 F(x, y)}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2 F(x, y)}{\partial^2 y} \right)$$

descreve o operador de Schrodinger quando não existe energia potencial (ou seja, $V = 0$).

No caso de se considerar apenas a energia cinética estaremos buscando autovalores λ do operador de Schrodinger (que são expressos usualmente como $\lambda = -s(s-1)$, onde s é da forma $s = 1/2 + i\rho$, $\rho \in \mathbb{R}$).

Sendo assim uma autofunção deve satisfazer

$$-y^2 \left(\frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial^2 y} \right) = -s(s-1) \psi(x, y).$$

$n=1$

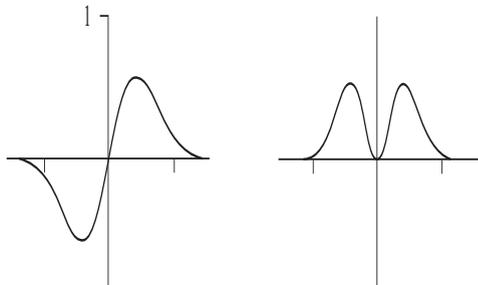


Figura 7.5: Seja ψ_1 a segunda autofunção do oscilador harmônico. A esquerda seu gráfico e a direita o gráfico de $|\psi_1|^2$

O s -Helgason kernel é definido como

$$\left(\frac{y}{(x-t)^2 + y^2}\right)^s,$$

onde t é um parâmetro real.

Fixada qualquer distribuição f na reta real (ver seção 1.13, mas poderia ser também um função integrável $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$), então

$$\int f(t) \left(\frac{y}{(x-t)^2 + y^2}\right)^s dt = \psi(x, y)$$

determina uma autofunção de

$$y^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2}{\partial^2 y} \right),$$

associada ao autovalor real $s(s-1)$ [132], [35] ou [187].

No caso de se considerar um superfície compacta obtida como quociente de B pela ação de um grupo hiperbólico existirão restrições sobre a distribuição f para que a autofunção seja automorfa [35] [187].

Referimos o leitor para [161] para resultados gerais sobre o espectro do operador de Schrodinger em variedades Riemannianas.

5) No caso do sistema estar sob a ação de uma campo eletromagnético externo devemos considerar uma função $A(x)$ (o termo correspondente a parte elétrica) e $V(x)$ (o termo correspondente a parte magnética).

O correspondente Hamiltoniano quantizado será

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - \frac{e}{c} \mathcal{A} \right)^2 + e\mathcal{V},$$

onde e é a carga da partícula.

A evolução temporal da função de onda ψ_t será descrita pela equação de Schrödinger deste potencial. Referimos o leitor para a seção 3.1 em [9] para um discussão sobre o operador Hamiltoniano associado a este problema.

O Hamiltoniano do oscilador harmonico unidimensional com termo magnético e massa $m = 1$ é

$$\frac{1}{2} \left[\left(-i\hbar \frac{d}{dx} + b x \right)^2 + w^2 x^2 \right],$$

onde $b = -\frac{e}{c}$.

Obtemos assim o operador

$$\varphi \rightarrow \mathbf{H}(\varphi) = \frac{1}{2} \left[-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \varphi - b x \hbar i \frac{d}{dx} \varphi - \hbar i \frac{d}{dx} (b x \varphi) + (b^2 x^2 + w^2 x^2) \varphi \right].$$

Neste caso

$$e^{-(w^2 + b i) x^2 \frac{1}{2\hbar}}$$

é autofunção associada ao autovalor $\lambda = \frac{1}{2} w \hbar$.

Um interessante estudo da equação

$$\mathbf{H}(\varphi) = -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + a(x) \frac{d\varphi(x)}{dx} + V(x) \varphi(x) = \lambda \varphi(x)$$

e sua relação com difusões e a formula de Feynman-Kac aparece em [269], [212] e também em (5.39) na pagina 225 do capítulo 15 em [160]. Sobre o espectro ver seção 13 capítulo 15 em [160]. O termo $a(x) \frac{d\varphi(x)}{dx}$ é denominado drift (ver Teorema 4.1 na pagina 124 de [106] e expressão (4.1) página 139 em [106]).

A análise do limite semiclássico do ground state associado ao caso da equação acima aparece em [138].

n=2

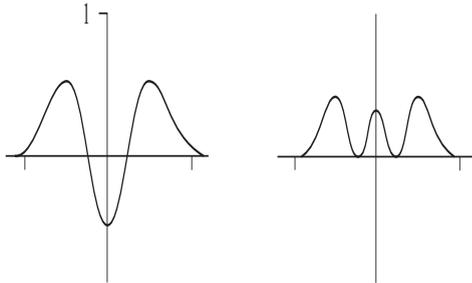


Figura 7.6: Seja ψ_2 a terceira autofunção do oscilador harmônico. A esquerda seu gráfico e a direita o gráfico de $|\psi_2|^2$

Capítulo 8

Princípio da Incerteza e o Pacote de Onda Gaussiano

Uma das questões que vamos analisar nesta seção é a eventual relação entre fazer medições simultâneas da posição e do momento de uma partícula que se encontra num determinado estado.

Definição 8.1. Suponhamos que ψ em \mathcal{H} não esteja normalizada. Seja $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ um observável, o valor esperado de A é dado por

$$E_\psi(A) = \frac{\langle \psi, A\psi \rangle}{\|\psi\|^2}$$

Em Estatística se está muitas vezes interessado em como estão dispersos os valores em torno da média. Por exemplo, suponha que esteja fixado $a > 0$ e consideremos a densidade Gaussiana ϕ_a de média espacial x_0 , e, variância a . Desta forma, o valor esperado da posição X é

$$E(X) = \int x\phi_a(x)dx = x_0.$$

Como a norma em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})(dx)$ de ϕ_a é igual a 1, a expressão

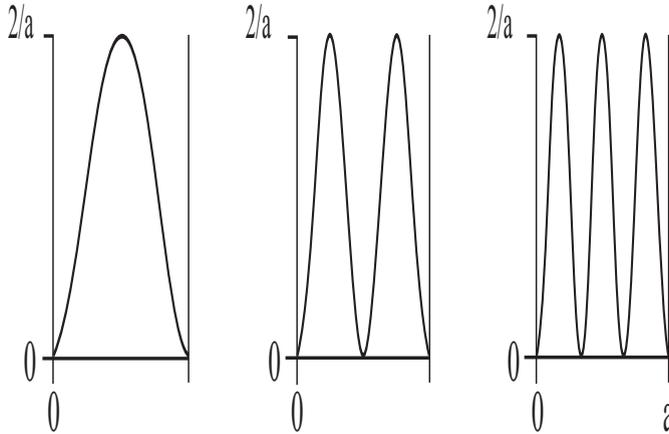


Figura 8.1: Exibimos acima o gráfico das três primeiras autofunções ao quadrado no caso do exemplo 2)

análoga à quântica descrita anteriormente seria

$$E_{\phi_a}(X) = \int \sqrt{\phi_a(x)} \sqrt{\phi_a(x)} x dx = x_0.$$

Vimos anteriormente que quanto menor o valor de a mais está concentrada a densidade em torno do ponto x_0 .

No limite, quando $a \rightarrow 0$, a densidade ϕ_a vai convergir a Delta Dirac no ponto x_0 , Neste caso limite, a posição espacial x da partícula vai estar "concentrada" totalmente em x_0 e não vai haver dispersão alguma.

A medida de dispersão dos dados x em torno de x_0 podem ser medidos através da expressão normalizada

$$\sqrt{\int (x^2 - x_0^2) \phi_a(x) dx} = \sqrt{\int x^2 \phi_a(x) dx} - x_0^2.$$

Neste caso, o valor acima é igual a a .

As expressões acima fazem sentido para uma densidade qualquer $\phi \geq 0$, $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ (tal que $\int \phi(x) dx = 1$).

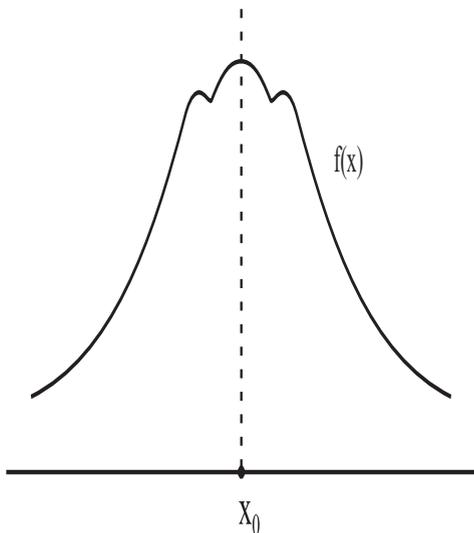


Figura 8.2: Densidade $f(x)$ com dados que possuem forte concentração em torno da média.

Assim, a média da posição espacial seria

$$E_{\phi}(X) = \int x\phi(x)dx.$$

e, a dispersão em torno da média $E_{\phi}(X)$ seria dada pela expressão

$$\sqrt{\int x^2 \phi(x) dx - E_{\phi}(X)^2}.$$

Quanto maior for este valor mais dispersos estão os valores de x em torno da média.

As figuras 8.2 e 8.3 descrevem dois casos distintos: o primeiro mostra o gráfico de uma densidade f que possui pouca dispersão e segundo com muita dispersão em torno da média.

Estes conceitos tem análogos relevantes também na Mecânica Quântica.

Lembre que dado um operador autoadjunto B e um estado ψ temos que $E_\psi(B) = \langle B\psi, \psi \rangle = \int B(\psi)(x) \overline{\psi(x)} dx$.

Definição 8.2. A dispersão de um observável A (autoadjunto portanto) em um estado ψ é dado por

$$\begin{aligned} \Delta_\psi(A) &= [E_\psi(A^2) - E_\psi(A)^2]^{\frac{1}{2}} = E_\psi[(A - E_\psi(A)I)^2]^{\frac{1}{2}} = \\ &= [\langle (A - E_\psi(A)I)(\psi), \psi \rangle]^{\frac{1}{2}} = \\ &= [\langle (A - E_\psi(A)I)(\psi), (A - E_\psi(A)I)(\psi) \rangle]^{\frac{1}{2}} = |(A - E_\psi(A)I)(\psi)|. \end{aligned}$$

Note que

$$\begin{aligned} E_\psi(A^2) - E_\psi(A)^2 &= \langle \psi, A^2(\psi) \rangle - \langle \psi, A(\psi) \rangle^2 = \\ &= \langle A(\psi), A(\psi) \rangle - \langle \psi, A(\psi) \rangle^2 = |A(\psi)|^2 - \langle \psi, A(\psi) \rangle^2. \end{aligned}$$

Ainda, $\langle \psi, A(\psi) \rangle^2 \leq |\psi|^2 |A(\psi)|^2 = |A(\psi)|^2$. Logo, $E_\psi(A^2) - E_\psi(A)^2 \geq 0$.

Suponha que preparássemos a partícula num estado ψ , e, fossemos medir o observável A , então, se a dispersão fosse muito pequena, isto significa que realizando repetidamente muitas vezes o experimento, observaríamos pouca variabilidade no resultado obtido.

Considere uma partícula quântica descrita pelo estado ψ . Suponha que ao observar a posição x_j , $j \in \{1, 2, \dots, n\}$, o valor esperado para o operador \mathcal{X}_j fosse $x_0 \in \mathbb{R}$, e, sua dispersão fosse muito pequena, então, com alta probabilidade a partícula no estado ψ estaria próxima de x_0 .

Vamos calcular o valor médio e a dispersão para o momento \mathcal{P} quando consideramos $\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(n\pi \frac{x}{a})$ (que é uma função de onda real diferenciável) no caso do exemplo 2) da seção anterior.

Ora, para qualquer $\psi \in \mathcal{H}$ diferenciável

$$E_\psi(\mathcal{P}) = \langle \psi | \mathcal{P} \psi \rangle = -\hbar i \int_0^a \psi(x) \psi'(x) dx = -\hbar i \frac{1}{2} [\psi(a)^2 - \psi(0)^2] = 0$$

Ainda,

$$\Delta_\psi(\mathcal{P})^2 = E_\psi(\mathcal{P}^2) - 0 = E_\psi(\mathcal{P}^2).$$

Note que $\mathcal{P}^2(\varphi_n) = \hbar^2 \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{n^2 \pi^2}{a^2} \text{sen}(n\pi \frac{x}{a})$, assim

$$\begin{aligned} \Delta_{\varphi_n}(\mathcal{P})^2 &= \langle \varphi_n | \mathcal{P}^2(\varphi_n) \rangle = \hbar^2 \frac{2}{a} \frac{n^2 \pi^2}{a^2} \int_0^a \text{sen}(n\pi \frac{x}{a})^2 dx = \\ &= \hbar^2 \frac{2}{a} \frac{n^2 \pi^2}{a^2} \frac{a}{2} = \hbar^2 \frac{n^2 \pi^2}{a^2}. \end{aligned}$$

Proposição 8.1. $\Delta_{\psi}(A) = 0 \iff \psi$ é autofunção de A .

Demonstração:

Seja α autovalor de A , então $A\psi = \alpha\psi$, sendo assim $E_{\psi}(A) = \frac{\langle \psi, \alpha\psi \rangle}{\|\psi\|^2} = \alpha$.

Desta forma

$$A(\psi) = E_{\psi}(A) \psi.$$

Ou seja, o autovalor é $E_{\psi}(A)$.

Suponha que $|\psi| = 1$.

Temos que por definição $E_{\psi}[(A - E_{\psi}(A)I)^2] = \Delta_{\psi}(A)^2$.

Ora, pela expressão equivalente descrita na definição

$$\Delta_{\psi}(A)^2 = |(A - E_{\psi}(A)I)(\psi)|^2 = |A(\psi) - E_{\psi}(A)\psi|^2$$

Portanto, $\Delta_{\psi}(A)^2 = 0 \iff A(\psi) = E_{\psi}(A)\psi$. ■

Dado um operador A se diz que o estado ψ pode ser medido com infinita precisão se $\Delta_{\psi}(A)^2 = 0$. Assim, se o estado ψ for preparado como uma autofunção de A teremos que ele pode ser medido através do observável A com precisão infinita. Como vimos antes se A e B comutam eles podem ser simultaneamente diagonalizáveis. Desta forma, se φ_n é um autovetor comum a A e B então ele pode ser medido com precisão infinita simultaneamente pelos observáveis A e B .

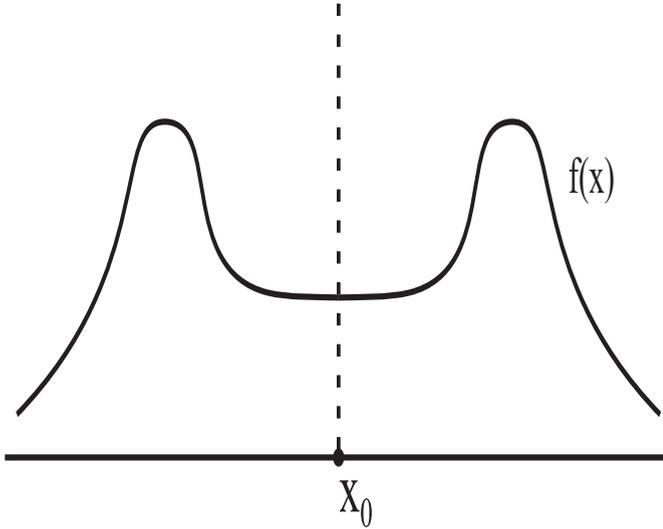


Figura 8.3: Densidade $f(x)$ com dados que possuem grande dispersão em torno da média. Alta probabilidade de encontrar valores bem distantes da média x_0 .

Lembre que pelo Postulado 4 as observações obtidas de um observável A só podem tomar valores nos autovalores de A (ou, no espectro).

Desta forma se formos observar A e colocarmos o estado exatamente numa autofunção ψ de A , então, os valores obtidos serão apenas $E_\psi(A)$.

O resultado acima justifica de certo modo o sentido do Postulado 4. As autofunções são estados sem dispersão, ou seja, estados do qual não existe ignorância estatística. Existe, prévio a uma observação, uma grande indeterminação ou ignorância estatística. Após a observação, ao se produzir um determinado autovalor, a nossa ignorância do resultado desapareceu.

Seja ψ um estado, vamos analisar os valores esperados e dispersão dos observáveis \mathcal{X}_j , \mathcal{P}_j , $j \in \{1, 2, \dots, n\}$.

Denotemos por $\langle \mathcal{X}_j \rangle_\psi$ e $\langle \mathcal{P}_j \rangle_\psi$ os valores esperados de, respectivamente, $\mathcal{X}_j, \mathcal{P}_j$. Então a dispersão destes operadores pode ser dada pelas seguintes fórmulas:

$$(\Delta_\psi \mathcal{X}_j)^2 = (\Delta \mathcal{X}_j)^2 = \langle (\mathcal{X}_j - \langle \mathcal{X}_j \rangle_\psi I)^2 \rangle_\psi$$

e

$$(\Delta_\psi \mathcal{P}_j)^2 = (\Delta \mathcal{P}_j)^2 = \langle (\mathcal{P}_j - \langle \mathcal{P}_j \rangle_\psi I)^2 \rangle_\psi.$$

Note que

$$\begin{aligned} (\Delta_\psi(\mathcal{P}_j))^2 &= \langle \mathcal{P}_j(\psi), \mathcal{P}_j(\psi) \rangle - \langle \psi, \mathcal{P}_j(\psi) \rangle^2 = \\ &= \langle \widehat{\mathcal{P}_j(\psi)}, \widehat{\mathcal{P}_j(\psi)} \rangle - \langle \hat{\psi}, \widehat{\mathcal{P}_j(\psi)} \rangle^2 = \\ &= \langle p_j \hat{\psi}, p_j \hat{\psi} \rangle - \langle p_j \hat{\psi}, \hat{\psi} \rangle^2, \end{aligned}$$

que é também a dispersão da variável clássica p_j no estado $\hat{\psi}$.

Teorema 8.2. (*Princípio da incerteza de Heisenberg*)

Para todo estado $\psi \in D(\mathcal{X}_j) \cap D(\mathcal{P}_j)$ vale que

$$\Delta \mathcal{X}_j \Delta \mathcal{P}_j \geq \frac{\hbar}{2}$$

Demonstração: Lembre que $\frac{i}{\hbar}[\mathcal{P}_j, \mathcal{X}_k] = \delta_{jk} I$. Vamos supor, sem perda de generalidade que $\langle \mathcal{X}_j \rangle_\psi = \langle \mathcal{P}_j \rangle_\psi = 0$.

Isto pode ser feito porque se $\langle \psi, \mathcal{X}_j(\psi) \rangle = a_j$ e $\langle \psi, \mathcal{P}_j(\psi) \rangle = b_j$, poderíamos considerar $\tilde{\mathcal{X}}_j = (\mathcal{X}_j - \overline{a_j} I)$ e $\tilde{\mathcal{P}}_j = (\mathcal{P}_j - \overline{b_j} I)$. Considerando agora $\tilde{\mathcal{X}}_j$ e $\tilde{\mathcal{P}}_j$, o desenvolvimento a seguir poderia ser adaptado a este novo par de operadores.

Assim, $(\Delta \mathcal{X}_j)^2 = |\mathcal{X}_j(\psi)|^2$ e $(\Delta \mathcal{P}_j)^2 = |\mathcal{P}_j(\psi)|^2$.

Note que para dois operadores autoadjuntos A, B temos que

$$\langle i[A, B] \rangle_\psi = -2Im \langle A\psi, B\psi \rangle.$$

De fato,

$$\begin{aligned} \langle i[A, B] \rangle_\psi &= i \langle \psi, AB\psi \rangle - i \langle \psi, BA\psi \rangle = i \langle A\psi, B\psi \rangle - i \langle B\psi, A\psi \rangle = \\ &= i(\langle A\psi, B\psi \rangle - \overline{\langle A\psi, B\psi \rangle}) = -2Im \langle A\psi, B\psi \rangle. \end{aligned}$$

Desta forma, pela desigualdade de Cauchy-Schwartz

$$1 = \langle \psi, \psi \rangle = \langle \psi, \frac{i}{\hbar} [\mathcal{P}_j, \mathcal{X}_j] \psi \rangle = -\frac{2}{\hbar} \text{Im} \langle \mathcal{P}_j \psi, \mathcal{X}_j \psi \rangle \leq \frac{2}{\hbar} |\langle \mathcal{P}_j \psi, \mathcal{X}_j \psi \rangle| \leq \frac{2}{\hbar} \|\mathcal{P}_j \psi\| \|\mathcal{X}_j \psi\| = \frac{2}{\hbar} (\Delta \mathcal{P}_j)(\Delta \mathcal{X}_j).$$

Logo, $\Delta \mathcal{X}_j \Delta \mathcal{P}_j \geq \frac{\hbar}{2}$. ■

Como se sabe, \mathcal{X}_j e \mathcal{P}_j não comutam. Assim, fixado um estado ψ , ao observar a posição x_j e o momento p_j temos interferência na observação. A expressão acima $\Delta \mathcal{X}_j \Delta \mathcal{P}_j \geq \frac{\hbar}{2}$ nos fornece uma estimativa numérica do produto das respectivas dispersões.

Vamos elaborar sobre isto. Se fosse preparado um aparato que colocasse a partícula no estado ψ , e, se desejássemos medir simultaneamente a posição x_j e o momento p_j , então seria válida a expressão $\Delta \mathcal{X}_j \Delta \mathcal{P}_j \geq \frac{\hbar}{2}$. Desta forma, se conseguíssemos colocar a partícula num estado ψ , de tal forma que a posição x_j esteja muito bem concentrada em torno de x_0 , então a medição do momento p_j para tal ψ é tal que a dispersão não pode ser muito pequena.

Por exemplo, se a posição x_j fosse descrita por ψ que é a densidade Gaussiana de media 0 e variância (dispersão) a , então a distribuição da sua transformada de Fourier seria a densidade Gaussiana de media 0 e variância (dispersão) $\hbar \frac{1}{a}$. Note que se a é pequeno, então, $\hbar \frac{1}{a}$ é grande. Este resultado se torna muito natural aos olhos do Princípio da Incerteza.

A expressão $\mathcal{F}((2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \langle p_0, x \rangle}) = \delta_{p_0}(p)$ (no sentido de distribuições) indica que podemos pensar, de forma heurística, em

$$x \rightarrow (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \langle p_0, x \rangle}$$

como, o "estado" (infelizmente, não está em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$) que descreve uma partícula como momento p_0 (e, com dispersão de \mathcal{P} igual a zero) e tal que a média de \mathcal{X} é igual a zero. A dispersão de \mathcal{X} seria, num certo sentido, a máxima possível. Estas afirmações pictóricas

corroboram o princípio da incerteza: $\Delta\mathcal{X}$ grande implica em $\Delta\mathcal{P}$ pequeno, e, vice-versa.

A análise do pacote Gaussiano é um pouco diferente do descrito acima.

Definição 8.3. O estado

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi a^2)^{n/4}} e^{-\frac{|x-x_0|^2}{4a^2}} e^{\frac{i}{\hbar}\langle p_0, x \rangle}.$$

onde a é real positivo, e, $x_0, p_0 \in \mathbb{R}^n$, é chamado de pacote de ondas gaussiano. Algumas vezes se usa a terminologia: este estado está micro-localizado em (x_0, p_0) . Em função das unidades dimensionais da constante de Plank é natural tomar $a = \sqrt{\hbar/m}$.

Referimos o leitor a [119] para uma análise bastante detalhada e com muitos exemplos dos tópicos em consideração.

O pacote de ondas gaussiano satisfaz as seguintes propriedades: $\Delta(\mathcal{X}) = a$, $E(\mathcal{X}) = x_0$, $E(\mathcal{P}) = p_0$ (ver (6.9) Chapter 6 page 182 [250]).

Note que

$$|\psi(x)|^2 = \frac{1}{(2\pi a^2)^{n/2}} e^{-\frac{|x-x_0|^2}{2a^2}} = \frac{1}{(2\pi \hbar/m)^{n/2}} e^{-\frac{|x-x_0|^2}{2\hbar}}$$

é a densidade Gaussiana de média x_0 e variância (dispersão) $a = \sqrt{\hbar/m}$. Assim, quando a massa é grande a dispersão é pequena.

Tal estado é chamado de pacote de onda (ou, pacote Gaussiano) situado em x_0 com dispersão $a = \sqrt{\hbar/m}$. Estes estados minimizam a relação de incerteza de Heisenberg. Como veremos em breve vale a relação

$$\Delta(\mathcal{X}) \Delta(\mathcal{P}) = \frac{\hbar}{2}.$$

Sendo assim, atinge o que melhor se pode esperar (devido ao Princípio da Incerteza) em termos de boa localização simultaneamente para x em torno de x_0 e ainda para p em torno de p_0 .

O pacote de onda Gaussiano, para $x_0 = 0$ e $n = 1$ é

$$\psi_0(x) = \frac{1}{(2\pi a^2)^{1/4}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2}} e^{\frac{i m v x}{\hbar}} = \frac{1}{(2\pi a^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{4a^2}} e^{\frac{i p x}{\hbar}},$$

descreve o que se entende em Mecânica Quântica por uma partícula centrada em x_0 , com momento $p = mv$, e, com dispersão $\Delta_{\psi_0}(\mathcal{X}) = a$. Como vimos acima o parâmetro $a = \sqrt{\hbar/m}$ descreve a dispersão em torno de 0. Note que $|\psi_0(x)|^2$ determina um distribuição gaussiana de variância (dispersão) $a = \sqrt{\hbar/m}$.

Se o pacote Gaussiano tem pequena dispersão a vamos entender isto como a descrição de uma partícula "quase" clássica.

Existem outros pacotes de onda importantes. Uma discussão interessante e abrangente aparece em [53].

Vamos analisar a evolução temporal do pacote Gaussiano sob a ação do Hamiltoniano \mathbf{H}_0 , ou seja, com potencial nulo.

Usando a expressão integral $\psi_t(x) = \mathcal{K}_t(\psi_0)(x)$, obtida anteriormente, podemos calcular (por exemplo via cálculo de resíduos [58])

$$\psi_t(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4}} (a^2 [1 + \frac{i\hbar t}{2ma^2}])^{-1/2} e^{\frac{imx^2}{2\hbar t}} e^{m^2 \frac{(x-vt)^2 a^2}{2im\hbar a^2 - \hbar^2 t^2}}.$$

Segue então que

$$|\psi_t(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} (2(a^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 a^2}))^{-1/2} e^{-\frac{(x-vt)^2}{2(a^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 a^2})}}.$$

Uma conta fácil mostra que

$$E_{\psi_t}(\mathcal{X}) = vt = \frac{p}{m} t.$$

Assim, concluímos que o valor médio da posição da partícula quântica acompanha o que acontece com a partícula clássica.

A partir da expressão para $|\psi_t(x)|^2$ acima obtida, concluímos que o termo $a(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4})^{1/2} = \Delta_{\psi_t}(\mathcal{X})$ representa a dispersão do estado ψ_t ao longo do tempo, e, que vai a infinito como t . Desta forma o comportamento da densidade ψ_t ao longo do tempo t , quando t fica muito grande, apresenta uma certa similaridade com o Movimento Browniano [159]. Na seção 2.11 de [189] vamos fazer um paralelo da Mecânica Quântica com o Movimento Browniano e difusões.

Note que segue do descrito acima que $\Delta_{\psi_0}(\mathcal{X}) = a = \sqrt{\hbar/m}$.

Para t fixo o ponto de maior probabilidade de encontrar a partícula quântica é $x = vt$. Isto porque o valor da densidade $|\psi_t(x)|^2$ é

máxima em $x = vt$. Obtemos assim uma certa analogia como o sistema clássico associado. De fato, note que se o potencial no sistema Hamiltoniano clássico for nulo, então a evolução temporal clássica da posição, a partir de uma condição inicial colocada em $x = 0$, e, com velocidade v , depois de um tempo t , será $x = vt$.

Lembre que $\mathcal{F}(e^{\frac{-x^2}{4a^2}} e^{-i\frac{p_0}{\hbar}x}) = \frac{\sqrt{2}a}{\hbar} e^{\frac{-a^2(p-p_0)^2}{\hbar^2}}$, e, assim, o momento do estado pacote de onda Gaussiano com média espacial 0, momento p_0 e dispersão a , no tempo $t = 0$, é descrito no espaço dos momentos pelo estado

$$\phi(p) = c e^{\frac{-a^2(p-p_0)^2}{\hbar^2}},$$

onde c é uma constante de normalização.

$$\text{Assim, } |\phi(p)|^2 = c^2 e^{\frac{-2a^2(p-p_0)^2}{\hbar^2}}.$$

Desta forma, se a localização do pacote em torno do $x = 0$ é muito intensa (pequena dispersão a), seu momento, por outro lado tem grande dispersão em torno de p_0 (se obtém o valor $\frac{\hbar}{2a}$). Assim, $\Delta_{\psi_0}(\mathcal{P}) = \frac{\hbar}{2a}$.

Desta forma, a partir das contas feitas acima, temos precisamente que $\Delta_{\psi_0}(\mathcal{X}) \Delta_{\psi_0}(\mathcal{P}) = \frac{\hbar}{2}$. Ou seja, o pacote Gaussiano determina o valor mínimo possível dentro do requerido pelo Princípio da Incerteza.

Note que $a = \sqrt{\hbar/m}$ e na seção 2.16 de [189] vamos considerar o limite semiclássico de um pacote Gaussiano e tal questão será relevante ao tomar $m \rightarrow \infty$ com \hbar fixo..

Se considerássemos a família ϕ_t indexada por t dada por

$$\phi_t(x) = e^{-(x-vt)^2 + ik_0(x-vt)},$$

onde k_0, v estão fixos, e, t é variável, descreveríamos a evolução de um pacote de ondas não dispersivo. Ou, seja $\Delta(\phi_t)$ constante, e $E(\phi_t) = vt$. O pacote de onda se desloca com velocidade v .

Vamos agora calcular a energia do pacote de ondas Gaussiano no caso unidimensional. O pacote Gaussiano para $x_0 = 0$ é da forma

$$\psi_0(x) = A \exp^{ikx - x^2/(2\sigma)}$$

onde $A = \frac{1}{(2\pi a^2)^{1/4}}$, é a constante de normalização, e ainda $k = \frac{p}{\hbar}$ e $\sigma = 2a^2$.

Sabemos que

$$\psi_0^*(x)\psi_0(x) = |A|^2 \exp^{-x^2/\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \exp^{-x^2/\sigma}.$$

Neste cálculo, precisamos dos valores explícitos das seguintes integrais

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2/\sigma) dx = \sqrt{2\pi} a$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2/\sigma) x^2 dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sigma^{3/2}$$

Ora,

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_0 \psi(x) &= -(\hbar^2/2m)(d^2/dx^2)\psi(x) \\ &= -(\hbar^2/2m)[(ik - x/\sigma)^2 - 1/\sigma]\psi(x) \\ &= (\hbar^2/2m)[k^2 - x^2/\sigma^2 + 2ikx/\sigma + 1/\sigma]\psi(x). \end{aligned}$$

Sendo assim,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{H}_0 \rangle_{\psi_0} &= (\hbar^2/2m)[k^2 - \langle x^2 \rangle_{\psi_0} / \sigma^2 + 2ik \langle x \rangle_{\psi_0} / \sigma + 1/\sigma] \\ &= (\hbar^2/2m)[k^2 - (1/2\sigma) + 1/\sigma] \\ &= (\hbar^2/2m)[k^2 + 1/(2\sigma)] = (\hbar^2/2m)[\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 + 1/(4a^2)] \end{aligned}$$

Capítulo 9

Operador densidade

Existe um espécie de dicionário em que os objetos clássicos tem seus correpondentes quânticos. Os pontos no cenário clássico são com deltas Dirac enquanto que no quântico são estados (a descrição formal da aleatoriedade da partícula), as funções (observáveis reais) correspondem a operadores autoadjuntos e finalmente as probabilidades vão corresponder aos operadores densidade.

Note que se φ_n for autofunção normalizada do operador Hamiltoniano \mathbf{H} , então $\varphi_n e^{ia}$, $a \in \mathbb{R}$, também o será. Ainda, as densidades associadas a $|\varphi_n|^2$ e a $|\varphi_n e^{ia}|^2$ são as mesmas. Assim, existe uma certa ambiguidade na obtenção da densidade a partir da φ_n no caso da partícula estar no nível de energia λ_n .

Os operadores densidade, que são uma generalização dos estados (elementos no espaço de Hilbert \mathcal{H}), permitem descrever de forma mais apropriada e elegante os conceitos que foram anteriormente analisados [211].

Nesta seção vamos supor que os operadores considerados possuam um conjunto ortonormal completo.

Seja um operador $\rho : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ que é autoadjunto, e, que possui um conjunto ortonormal completo enumerável denotado por φ_n , $n \in \mathbb{N}$. Vamos assumir que exista um autovalor mínimo. O traço, quando existir, é por definição, a soma de todos os seus autovalores λ_n . Os autovalores são sempre tomados com a indexação em n de tal forma

que λ_n seja não decrescente. Estamos assumindo que esta soma

$$\sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n$$

seja finita (o que poderia no caso geral não acontecer). Denotamos por $\text{Tr}(\rho)$ (quando existe) o traço do operador ρ . Os operadores "trace class" (ver seção 2 cap IX [57] ou seção 3.5 em [14]) serão o objeto da próxima seção e darão a classe de exemplos de operadores para os quais se consegue calcular o traço.

Observe que se A é autoadjunto, possui traço e se escreve como

$$A = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n P_{\varphi_n},$$

então o somatório acima é absolutamente convergente, isto é, vale a propriedade $\sum_{n=0}^{\infty} |\lambda_n P_{\varphi_n}| < \infty$ (lembre que uma operador projeção tem norma 1).

Fica assim descrito de maneira esquemática o que é o traço.

A definição abaixo é mais apropriada para futuras generalizações.

Definição 9.1. Suponha que o operador $\rho : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ autoadjunto possua um conjunto ortonormal completo enumerável de autovetores φ_n , $n \in \mathbb{N}$, então o traço é dado por

$$\sum_n \langle \varphi_n, \rho \varphi_n \rangle.$$

Mais geralmente, dado um operador A (não necessariamente autoadjunto) por definição o traço de A é dado por

$$\sum_n \langle \varphi_n, \rho \varphi_n \rangle$$

(quando existe) onde φ_n , $n \in \mathbb{N}$ é um conjunto ortonormal completo. O fato de que esta bem definido o traço (independente do conjunto ortonormal completo) será objeto do desenvolvimento subsequente

Se ρ_1 e ρ_2 são autoadjuntos, então fixado um conjunto ortonormal completo qualquer ϕ_n , $n \in \mathbb{N}$, o traço de $\rho_1 \circ \rho_2$ é por definição

$$\sum_n \langle \phi_n, (\rho_1 \circ \rho_2) \phi_n \rangle.$$

O fato que está bem definido o traço de $\rho_1 \circ \rho_2$, e independe da escolha de ϕ_n , $n \in \mathbb{N}$, está assegurado pelo próximo resultado.

Antes disto observe o seguinte formalismo que é muito útil e que sera utilizado a seguir.

O operador projeção sobre o vetor unitário $v = |v\rangle \in \mathcal{H}$ pode ser expresso na notação de Dirac como $P_v = |v\rangle\langle v|$.

Lembre que mostramos na seção de pre-requisitos que

$$\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = I$$

e também que

$$\begin{aligned} \langle P_\psi(\phi), \theta \rangle &= \langle\langle\phi|\psi\rangle\psi, \theta\rangle = \\ &= \langle\phi, \psi\rangle\langle\psi|\theta\rangle = \langle\phi| |\psi\rangle\langle\psi| |\theta\rangle = \langle\psi|\theta\rangle\langle\phi, \psi\rangle \quad (*). \end{aligned}$$

Teorema 9.1. *Suponha que A e B são autoadjuntos e os traços de A , B , AB e BA estejam bem definidos. Então*

1) *O traço de A , definido via a expressão $\sum_n \langle\varphi_n, A\varphi_n\rangle$, não depende da escolha do conjunto ortonormal completo (mesmo que não seja constituído por autovetores).*

2) $Tr(AB) = Tr(BA)$.

Demonstração:

Seja $B = \sum_m a_m P_{\psi_m}$, e, ψ_n , $n \in \mathbb{N}$, um conjunto ortonormal completo (assim, dado o operador A podemos escrever $\langle A(\phi)| = \sum_m \langle A(\phi)|\psi_m\rangle\langle\psi_m|$).

Note que o somatório para B é absolutamente convergente.

Note que $\sum_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m| = I$.

Assim, se ϕ_n , $n \in \mathbb{N}$ é outro conjunto ortonormal completo temos (usando $(*)$ acima) que

$$\begin{aligned} \sum_n \langle\phi_n|(AB)(\phi_n)\rangle &= \sum_n \langle A(\phi_n)|B(\phi_n)\rangle = \\ &= \sum_n \langle A(\phi_n), I(B(\phi_n))\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_n \langle A(\phi_n) | \left[\sum_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m| \right] (B(\phi_n)) \rangle = \\
& \sum_n \sum_m \langle A(\phi_n) | \psi_m\rangle \langle \psi_m | B(\phi_n) \rangle = \\
& \sum_n \sum_m \langle \psi_m | B(\phi_n) \rangle \langle A(\phi_n) | \psi_m \rangle = \\
& \sum_n \sum_m \langle B(\psi_m) | \phi_n \rangle \langle \phi_n | A(\psi_m) \rangle = \\
& \sum_n \sum_m \langle B(\psi_m) | (|\phi_n\rangle \langle \phi_n|) | A(\psi_m) \rangle = \\
& \sum_m \langle B(\psi_m) | \left(\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \right) | A(\psi_m) \rangle = \\
& \sum_m \langle B(\psi_m) | I(A(\psi_m)) \rangle = \sum_m \langle B(\psi_m) | A(\psi_m) \rangle = \\
& \sum_m \langle \psi_m | (BA)(\psi_m) \rangle .
\end{aligned}$$

Acima usamos o fato que $\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = I$.

Note que se dois somatórios são tais que cada um é absolutamente convergente, então se pode permutar os termos nos somatórios quando se faz o produto. Esta propriedade foi usada acima.

Isto prova 2). O item 1) segue de considerar $A = I$ no raciocínio acima.

O descrito acima justifica o sentido da última definição. ■

Note que se ρ_1 e ρ_2 são autoadjuntos então

$$\sum_n \langle \phi_n, (\rho_1 \circ \rho_2) \phi_n \rangle$$

é um número real.

Observamos que estamos sendo um pouco informais no tratamento do traço no caso de dimensão infinita. Como destaca [67]

(ver também [62]) na seção Precautions 2.2.2 tudo funciona de forma mais simples no caso de dimensão finita mas cuidados maiores são necessários em dimensão infinita.

Definição 9.2. Um operador $\rho : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ é dito um operador densidade se ele é autoadjunto, se possui um conjunto ortonormal completo enumerável de autovetores, se é positivo, e, ainda, se tem traço igual a 1.

Neste caso todos os autovalores são números reais não negativos e menores ou iguais a 1.

Os operadores densidade correspondem na Mecânica Quântica as probabilidades clássicas.

É natural associar o estado ψ - um elemento no espaço de Hilbert - ao operador densidade $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$.

Note que ψ e ψe^{ia} , com a real, definem o mesmo P_ψ . Em outras palavras temos que $|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi e^{ia}\rangle\langle\psi e^{ia}|$. Ou seja, a ambiguidade do estado ψ desaparece quando olhamos o problema do ponto de vista de operador densidade.

Existem operadores densidade que não são projeções. Um operador densidade é uma projeção, se e só se, $\rho^2 = \rho$.

A matriz

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} i \\ \frac{1}{\sqrt{2}} i & 1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

define um operador densidade agindo em $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$.

Suponha que \mathcal{H} possua um conjunto ortonormal completo enumerável φ_n , $n \in \mathbb{N}$. Seja $c_n \geq 0$, $n \in \mathbb{N}$, sequência tal que $\sum_n c_n = 1$. Então é fácil ver que $\rho = \sum_n c_n P_{\varphi_n}$ define um operador densidade. Note que $\rho^2 = \sum_n c_n^2 P_{\varphi_n}$, e, assim, em geral, não é igual a ρ . Observe também que a composta de operadores densidade pode não ser um operador densidade.

Note que se A_n , $n \in \mathbb{N}$, forem operadores densidade, e, c_n são números não negativos tais que $\sum_n c_n = 1$, então $\sum c_n A_n$ é um operador densidade. Assim, o espaço dos operadores densidade é um convexo.

É importante não confundir o **vetor** $\sum c_n \varphi_n$ no espaço de Hilbert com o **operador** densidade $\rho = \sum_n c_n P_{\varphi_n}$.

Observação Dado um operador densidade ρ (que pode ser expresso como $\rho = \sum_n c_n P_{\varphi_n}$ pelo teorema espectral), então, se ρ^2 for também operador densidade, deve ter traço igual a 1, logo, concluímos que todos os c_n , menos um deles, tem que ser zero. Assim, ρ é um operador projeção.

Os operadores densidade generalizam o conceito de estado e se encaixam de forma mais natural no ponto de vista de Heisenberg.

Note que se ρ é um operador densidade então

$$\rho(t) = e^{t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}} \rho e^{-t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}}$$

é autoadjunto, é positivo e tem traço 1 (demonstração ao fim desta seção).

Assim, $\rho(t)$, $t \geq 0$, descreveria a evolução de um operador densidade inicial através do fluxo descrito pela formulação de Heisenberg.

Em Mecânica Estatística Quântica, como veremos nas seções 1.10 e 2.12 de [189], estaremos interessados, prioritariamente, em operadores densidade. Lá vai ser muito útil o fato que o operador \mathbf{H} , e a incógnita do problema (um operador densidade), sejam ambos operadores.

Os operadores densidade desempenham na Mecânica Quântica o papel das probabilidades na Teoria da Probabilidade. No nosso contexto, eles permitem capturar as interferências entre as distintas possibilidades. Se o espaço de Hilbert \mathcal{H} fosse o \mathbb{C}^3 , por exemplo, então, o operador autoadjunto geral é descrito por uma matriz A , três por três, com entradas complexas tal que a matriz transposta conjugada de A é igual a A (ver[178]). Um operador densidade é uma matriz positiva tal que a soma dos autovalores dá o valor 1. Sistemas desta forma aparecem de maneira natural em Computação Quântica (ver [217] [27] [25]).

Por exemplo, a matriz

$$P = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & 0 \\ 0 & p_2 & 0 \\ 0 & 0 & p_3 \end{pmatrix},$$

onde p_1, p_2, p_3 são reais não negativos, e, somam 1 é um exemplo de operador densidade

O mundo da Probabilidade, ou, da Mecânica Estatística, num certo sentido, está "mergulhado" no cenário Quântico, através das matrizes diagonais.

Muitas vezes os estados que somos levados a considerar são um mistura de estados φ_n que são autofunções do operador Hamiltoniano \mathbf{H} .

Por exemplo, em algumas situações podemos ser levados a considerar dois operadores projeção P_{F_1} e P_{F_2} , $F_1, F_2 \in \mathbb{H}$, que atuam simultaneamente em estados ψ e que produzem novos estados $P_{F_1}(\psi)$ e $P_{F_2}(\psi)$. Suponha que por alguma razão eles são produzidos com probabilidade $1/3$ de sofrerem um processo de medição via $P_{F_1}(\psi)$, e, $2/3$ de sofrerem um processo de medição via $P_{F_2}(\psi)$. Por alguma razão de natureza física eles vão estar sujeitos a uma observação subsequente A (sobre os outputs produzidos $P_{F_1}(\psi)$ e $P_{F_2}(\psi)$). Fixado ψ , temos que $1/3 P_{F_1}(\psi) + 2/3 P_{F_2}(\psi)$ é de fato uma função de onda que pode ser normalizada (e resultar num novo estado), mas isto não tem nada a ver com a questão em análise. No problema descrito acima existe uma ignorância de qual output vai agir o observável A . Esta situação não pode ser caracterizada pelo ponto de vista anterior em que apenas considerávamos estados (ou seja, elementos no espaço de Hilbert \mathcal{H} de norma 1). O ponto sutil é: o operador $1/3 P_{F_1} + 2/3 P_{F_2}$ descreve esta ignorância (ou, incerteza).

Note também que $1/3 P_{F_1} + 2/3 P_{F_2}$ é, conceitualmente falando, distinto de $\psi = 1/3 F_1 + 2/3 F_2$, ou, mesmo de $P_{1/3 F_1 + 2/3 F_2}$.

Como dissemos antes um operador densidade deve ser encarado como a generalização natural ao sistema quântico (a nível de operadores) do conceito de probabilidade.

Definição 9.3. Dado um observável (operador autoadjunto) A , por definição, $Tr(\rho A)$ é o valor esperado de A quando o sistema quântico é descrito pelo operador densidade ρ . É usual denotar tal valor por $\langle A \rangle_\rho$ ou $E_\rho(A)$.

Os operadores autoadjuntos desempenham na Mecânica Quântica o papel das funções na Teoria da Probabilidade. Assim, $E_\rho(A)$ corresponde a "integrar" a "função" A em relação a "probabilidade" ρ .

Lembre que $Tr(A\rho) = Tr(\rho A)$. Ainda, note que se ρ e A comutassem (assim seriam simultaneamente diagonalizáveis), na forma $\rho = \sum_n \lambda_n P_{\varphi_n}$ e $A = \sum_n c_n P_{\varphi_n}$, então, $Tr(\rho A) = \sum_n c_n \lambda_n$.

Se $\rho = P_\psi$, para um estado ψ , então $Tr(P_\psi A) = \langle A\psi | \psi \rangle$. Assim, o conceito de valor esperado para operador é uma extensão daquele para estados.

De fato,

$$\begin{aligned} \langle (P_\psi A) v | v \rangle &= \langle (\langle Av | \psi \rangle \langle \psi |) | v \rangle = \\ &= \langle \langle Av | \psi \rangle \langle \psi | | v \rangle = \langle \psi, v \rangle \langle Av | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Considere ϕ_n tal que $I = \sum_n P_{\phi_n}$. Então, supondo que $\psi = \sum_n a_n \phi_n$, temos que

$$\begin{aligned} Tr(P_\psi A) &= \sum_n \langle (P_\psi A) \phi_n | \phi_n \rangle = \sum_n \langle \psi | \phi_n \rangle \langle A\phi_n | \psi \rangle = \\ &= \sum_n a_n \langle A\phi_n | \psi \rangle = \langle A \sum_n a_n \phi_n | \psi \rangle = \langle A(\psi), \psi \rangle = E_\psi(A). \end{aligned}$$

Desta forma a extensão do conceito está justificada.

Vamos apresentar uma interpretação do significado da ação de um operador densidade ρ sobre um observável A .

A uma densidade $\rho = \sum_j p_j P_{\psi_j}$ podemos associar as probabilidades das medições λ_i a serem obtidas quando aplicamos o observável $A = \sum_i P_{v_i} \lambda_i$ da seguinte maneira: suponha $\psi_j = \sum_i c_{ji} v_i$ onde $\{v_i\}$ é a base ortonormal de autovetores de A .

Então podemos dizer que o observável A associa a ρ a probabilidade $\sum_j p_j |c_{ji}|^2$ da medição λ_i ser obtida.

Note que a interpretação acima é justificada pelo fato de que

$$\begin{aligned} Tr(A\rho) &= Tr(A(\sum_j p_j \rho_{\psi_j})) = \\ &= \sum_j p_j Tr(A\rho_{\psi_j}) = \\ &= \sum_j p_j \sum_i |c_{ji}|^2 \lambda_i = \sum_i (\sum_j p_j |c_{ji}|^2) \lambda_i. \end{aligned}$$

Olhando as expressões $\psi_j = \sum_i c_{ji} v_i$ e $\sum_j p_j |c_{ji}|^2$ seria razoável pensar que $|c_{ji}|^2$ descreve a probabilidade de ψ_j passar a v_i .

Observação: O desenvolvimento acima mostra que se ρ é operador densidade e A é operador positivo, então $Tr(A\rho) = E_\rho(A)$ é um número positivo.

Um exemplo para esclarecer o leitor sobre o assunto: para um sistema quântico que se encontra em equilíbrio termodinâmico com um reservatório de calor, se sabe que este ocupa níveis de energia (e assim, determina diferentes estados no espaço de Hilbert \mathcal{H}) de acordo com uma certa distribuição de probabilidade (nestes níveis) de acordo com a assim chamada Lei de Boltzmann. Vamos elaborar sobre isto mais tarde na seção 1.10 e 2.12 de [189]. É natural assim tratar com operadores densidade e não com estados.

Considere o exemplo em que $\mathcal{H} = \mathbb{C}^3$, e que o operador densidade é diagonal

$$P = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & 0 \\ 0 & p_2 & 0 \\ 0 & 0 & p_3 \end{pmatrix}.$$

Um observável B é uma matriz autoadjunta. Assuma que B é diagonal:

$$B = \begin{pmatrix} b_1 & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & 0 \\ 0 & 0 & b_3 \end{pmatrix}.$$

onde b_1, b_2, b_3 são reais.

Note agora que traço $(B A) = p_1 b_1 + p_2 b_2 + p_3 b_3$. Esta expressão pode ser entendida como a integral da função $b : \{1, 2, 3\} \rightarrow \mathbb{R}$, tal que $b(i) = b_i$, $i = 1, 2, 3$, em relação a probabilidade P em $\{1, 2, 3\}$, associada aos valores p_1, p_2, p_3 . Assim, a expressão $Tr(B\rho) = E_\rho(B)$, que descreve a integração do observável B em relação ao operador densidade ρ , é uma generalização natural do cenário probabilístico.

Fica claro então que o cenário probabilístico se encontra dentro do cenário quântico via as matrizes diagonais. As matrizes complexas não diagonais permitem descrever as interferências (componente fundamental na Mecânica Quântica).

O conjunto dos operadores densidade é um conjunto convexo. De fato, suponha que ρ_1 e ρ_2 sejam operadores densidade e

$$\rho = a\rho_1 + (1 - a)\rho_2,$$

onde $a \in [0, 1]$. Então, $\rho^* = a\rho_1^* + (1-a)\rho_2^* = a\rho_1 + (1-a)\rho_2$ o que implica que ρ é autoadjunto.

Ainda, $\langle \rho(v), v \rangle = \langle (a\rho_1 + (1-a)\rho_2)(v), v \rangle = a \langle \rho_1(v), v \rangle + (1-a) \langle \rho_2(v), v \rangle \geq 0$.

Definição 9.4. Um operador densidade ρ é dito ser um estado puro se ele não pode ser escrito como combinação convexa não trivial de outros operadores densidade. Ou seja, se ρ não pode ser escrito como

$$\rho = aM_1 + (1-a)M_2,$$

onde $0 < a < 1$, e M_1 e M_2 são operadores densidade.

Teorema 9.2. *O conjunto dos operadores densidades que são estados puros é o conjunto dos operadores projeção.*

Demonstração:

Primeiro vamos mostrar que operadores projeção são estados puros.

Seja ψ no espaço de Hilbert \mathcal{H} e suponha que consideremos a combinação convexa

$$P_\psi = aM_1 + (1-a)M_2,$$

onde, $0 \leq a < 1$.

Seja F o subespaço unidimensional gerado por ψ .

Considere a decomposição $\mathcal{H} = F + F^\perp$.

Seja $\varphi \in F^\perp$. Então como M_1 e M_2 são operadores positivos, temos que

$$\begin{aligned} a \langle M_1(\varphi), \varphi \rangle &\leq a \langle M_1(\varphi), \varphi \rangle + (1-a) \langle M_2(\varphi), \varphi \rangle = \\ &\langle P_\psi(\varphi), \varphi \rangle = 0. \end{aligned}$$

Assim, para todo $\varphi \in F^\perp$, temos que $\langle M_1(\varphi), \varphi \rangle = 0$.

Afirmamos que um operador positivo A satisfaz a relação: $\forall \varphi, \phi$

$$| \langle A(\varphi), \phi \rangle |^2 \leq \langle A(\varphi), \varphi \rangle \langle A(\phi), \phi \rangle .$$

Vamos demonstrar esta afirmação ao fim da prova do Teorema.

Assim, tomando acima $A = M_1$ e $\phi = A(\varphi)$, obtemos que M_1 é constante igual a zero em F^\perp . Como M_1 é autoadjunto, ele deixa também invariante o subespaço vetorial F (o orthogonal a F^\perp conforme referencia [178]). Como o traço de M_1 é igual a 1 concluímos que $M_1(\psi) = P_\psi$. Logo a combinação convexa deve ser trivial.

Seja agora um operador densidade ρ que é um estado puro. Seja $\rho = \sum_{n \geq 0} \lambda_n P_{\varphi_n}$ sua decomposição espectral. Como ele é positivo e seu traço é igual a 1, temos que $\lambda_n \geq 0$, e $\sum_n \lambda_n = 1$. Suponha que existam λ_i e λ_j não nulos. Assim, $\rho = \lambda_i P_{\varphi_i} + \sum_{n \neq i} \lambda_n P_{\varphi_n} = \lambda_i P_{\varphi_i} + (1 - \lambda_i) \left[\frac{1}{1 - \lambda_i} \sum_{n \neq i} \lambda_n P_{\varphi_n} \right]$. Como ρ é puro temos contradição.

Vamos mostrar agora que operador positivo A satisfaz a relação:
 $\forall \varphi, \phi$

$$| \langle A(\varphi), \phi \rangle |^2 \leq \langle A(\varphi), \varphi \rangle \langle A(\phi), \phi \rangle .$$

Para um valor real s qualquer temos que

$$\langle A(\varphi + s\phi), (\varphi + s\phi) \rangle \geq 0.$$

Para um t qualquer tome $s = t \langle A(\varphi), \phi \rangle$.

Neste caso,

$$0 \leq \langle A(\varphi + s\phi), (\varphi + s\phi) \rangle = t^2 | \langle A(\varphi), \phi \rangle |^2 \langle A(\phi), \phi \rangle + 2t | \langle A(\varphi), \phi \rangle | \langle A(\varphi), \varphi \rangle .$$

Note que $\langle A(\varphi + s\phi), (\varphi + s\phi) \rangle$ é real, bem como $\int A(\varphi) \bar{\varphi} dx$ e $\int A(\phi) \bar{\phi} dx$.

Isto força com que o polinômio acima tenha apenas coeficientes reais.

Sendo assim o discriminante do polinômio de grau dois em t é negativo

$$4 | \langle A(\varphi), \phi \rangle |^4 - 4 | \langle A(\varphi), \phi \rangle |^2 \langle A(\phi), \phi \rangle \langle A(\varphi), \varphi \rangle \leq 0.$$

Disto segue a afirmação desejada. ■

Um operador densidade pode sempre ser expresso na forma

$$\rho = \sum_n \lambda_n P_{\varphi_n},$$

onde φ_n é um conjunto ortonormal completo enumerável. Os λ_n devem ser encarados como probabilidades e somam 1. Assim ρ pode ser expresso como combinação de estados puros.

Assim, se pode escrever de maneira mais apropriada

$$\rho = \sum_n p_n P_{\varphi_n},$$

onde, $\sum_n p_n = 1$.

Fixado um operador Hamiltoniano \mathbf{H} , nesta formulação mais geral, consideramos um operador densidade inicial ρ_0 no tempo $t = 0$, e, desejamos descrever a evolução temporal do operador ρ_t que satisfaz a equação

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_t = [\mathbf{H}, \rho_t].$$

A derivação em t acima usa a estrutura de espaço de Banach dos operadores limitados com a norma de operadores.

Esta equação generaliza $i\hbar \psi'(t) = \mathbf{H}(\psi(t))$.

A solução de forma explícita é

$$\rho_t = e^{-t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}} \rho_0 e^{t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}}.$$

Note que se ρ_0 é um operador densidade, então, o ρ_t dado pela expressão acima também é um operador densidade.

A formulação acima é consistente com a anterior. De fato, se $\rho_0 = P_{\psi_0}$, onde $\psi_0 \in \mathcal{H}$ é um estado, então, se ψ_t satisfaz a equação de Schrödinger como condição inicial ψ_0 , temos que

$$\psi(t) = e^{t \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H}}(\psi_0) = e^{-t i \frac{1}{\hbar} \mathbf{H}}(\psi_0).$$

Vamos mostrar que para todo $t \geq 0$ vale $\rho_t = P_{\psi_t}$.

Ora, $P_{\psi(t)} = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$, satisfaz para qualquer ϕ , η

$$\langle \eta | P_{\psi(t)}(\phi) \rangle = \langle \eta | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \phi \rangle.$$

Note que

$$P_{\psi_0} |e^{t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}} \phi \rangle = |\psi_0 \rangle \langle \psi_0 | e^{t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}} \phi \rangle = |\psi_0 \rangle \langle e^{-t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}} \psi_0 | \phi \rangle = |\psi_0 \rangle \langle \psi(t), \phi \rangle .$$

Por outro lado como $e^{-t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}} |\psi_0 \rangle = |e^{-t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}} \psi_0 \rangle$

$$\langle \eta | e^{-t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}} P_{\psi_0} e^{t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}} (\phi) \rangle = \langle \eta | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \phi \rangle .$$

Como as duas expressões são as mesmas para todo ψ e η concluimos que para todo t vale $P_{\psi(t)} = \rho_t$.

Desta forma fica mais uma vez natural pensar que a evolução temporal de operadores (formulação de Heisenberg) generaliza a evolução temporal de estados (formulação de Schrödinger).

Capítulo 10

Operadores Trace Class

Uma ótima referencia para os assuntos desta seção e da próxima é [14].

Todo operador autoadjunto positivo A possui uma raiz quadrada B , isto é, existe um operador B tal que $B^2 = A$ (ver final da seção de pre-requisitos).

Dado um operador $\rho : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ no espaço de Hilbert \mathcal{H} sempre temos que o operador $\rho^* \rho$ é positivo.

Assim, como $\rho \rho^*$ é um operador autoadjunto positivo ele possui raiz quadrada $(\rho \rho^*)^{1/2}$. Isto é $((\rho \rho^*)^{1/2})^2 = (\sqrt{\rho \rho^*})^2 = \rho \rho^*$.

Notação: $|\rho| = \sqrt{\rho^* \rho}$

Desta forma

$$\langle \rho^* \rho \phi, \phi \rangle = \langle \rho \phi, \rho \phi \rangle \geq 0, \forall \phi \in \mathcal{H}.$$

No caso em que $\rho : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ é limitado podemos definir alternativamente o operador positivo $|\rho| = \sqrt{\rho^* \rho}$ via série de potências [57] [241].

Definição 10.1. Um operador limitado $\rho : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ é dito trace class operator se para qualquer base ortonormal $\{\psi_j\}$ de \mathcal{H} vale que

$$\sum_j |\langle \psi_j, |\rho| \psi_j \rangle| < \infty.$$

Neste caso podemos definir, dada a base $\{\psi_j\}$, o traço do operador ρ como sendo

$$\text{tr} \rho = \sum_j \langle \psi_j, \rho \psi_j \rangle.$$

Esta definição não depende da escolha do conjunto ortonormal completo escolhido em \mathcal{H} (ver definição 3.4.2 em [14]).

Exemplo 10.1. Seja $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ um operador com espectro puramente pontual, $\sigma(A) = \sigma_p(A)$. Sejam ψ_n e E_n os autovetores de A e seu respectivos autovalores. Se $E_n \geq 0$ então A é trace class se e só se

$$\sum_j \langle \psi_j, |A| \psi_j \rangle < \infty \Leftrightarrow \sum_j \langle \psi_j, |E_j| \psi_j \rangle < \infty \Leftrightarrow \sum_j E_j < \infty.$$

Os operadores trace class formam um espaço de Banach com a norma

$$\|\rho\|_1 = \text{tr} |\rho|$$

que satisfaz as propriedades:

1. $\text{tr}(\alpha A + \beta B) = \alpha \text{tr} A + \beta \text{tr} B$, $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$ e $\forall A, B$ trace class;
2. se ρ é trace class e A é um operador limitado então ρA e $A \rho$ são trace class e $\text{tr} \rho A = \text{tr} A \rho$.

Seja $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ um operador limitado, auto-adjunto, com espectro puramente pontual. Sejam também $E_0 \leq E_1 \leq \dots$ os autovalores de A e ψ_n , $n = 0, 1, \dots$, os respectivos autovetores que formam um conjunto ortonormal completo. Se $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ é uma função analítica temos

Proposição 10.1. $f(A)$ é trace class e

$$\text{tr} f(A) = \sum_j f(E_j)$$

se a série converge absolutamente.

Demonstração: Supondo que a série $\sum_j f(E_j)$ é absolutamente convergente temos

$$\sum_j \langle \psi_j, |f(A)| \psi_j \rangle = \sum_j \langle \psi_j, |f(E_j)| \psi_j \rangle = \sum_j |f(E_j)| < \infty$$

de modo que $f(A)$ é trace class e portanto podemos calcular o traço

$$\text{tr} f(A) = \sum_j \langle \psi_j, f(A) \psi_j \rangle = \sum_j f(E_j).$$

□

Proposição 10.2. *Seja $K : [a, b]^2 \rightarrow \mathbb{C}$ uma função contínua tal que $K(x, y) = \overline{K(y, x)}$. O operador $\mathcal{K} : L^2([a, b]) \rightarrow L^2([a, b])$ definido por*

$$(\mathcal{K}f)(x) = \int_a^b K(x, y) f(y) dy$$

é autoadjunto, e, é trace class. Ainda, vale

$$\text{tr} \mathcal{K} = \int_a^b K(x, x) dx.$$

Demonstração:

O operador \mathcal{K} é compacto (ver seção X.2 [281] e Teorema 3.4.4 em [14]).

Seja φ_n , $n \in \mathbb{N}$, conjunto enumerável completo de autovetores para \mathcal{K} . Sejam ainda, λ_n , $n \in \mathbb{N}$, os respectivos autovalores.

Seja $B(x, y) = \sum_n \lambda_n \varphi_n(x) \overline{\varphi_n(y)}$.

Considere o operador \mathcal{B} tal que

$$(\mathcal{B}f)(x) = \int_a^b B(x, y) f(y) dy.$$

Ora, para cada k fixo

$$(\mathcal{B}\varphi_k)(x) = \int_a^b \sum_n \lambda_n \varphi_n(x) \overline{\varphi_n(y)} \varphi_k(y) dy = \sum_n \lambda_n \varphi_n(x) \int_a^b \overline{\varphi_n(y)} \varphi_k(y) dy =$$

$$\sum_n \lambda_n \varphi_n(x) \overline{\langle \varphi_n, \varphi_k \rangle} = \lambda_k \varphi_k(x)$$

Como os φ_k , $k \in \mathbb{N}$, geram o espaço de Hilbert, então, $\mathcal{K} = \mathcal{B}$. Logo, podemos assumir que $K = B$.

Ora,

$$\int_a^b K(x, x) dx = \int_a^b \sum_n \lambda_n \varphi_n(x) \overline{\varphi_n(x)} dx = \sum_n \lambda_n \langle \varphi_n, \varphi_n \rangle = \sum_n \lambda_n = \text{tr} \mathcal{K}.$$

□

Referimos o leitor a seção 9.2.2 em [66] para um discussão mais profunda sobre os tópicos que estamos superficialmente abordando.

Proposição 10.3. *Seja $K : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C}$ uma função contínua tal que $K(x, y) = \overline{K(y, x)}$. Suponha que $\int \int |K(x, y)|^2 dx dy < \infty$. O operador $\mathcal{K} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ definido por*

$$(\mathcal{K}f)(x) = \int K(x, y) f(y) dy$$

é autoadjunto, e, é trace class. Ainda, vale

$$\text{tr} \mathcal{K} = \int K(x, x) dx.$$

A demonstração é semelhante ao caso anterior.

Sendo assim, se um certo operador pode ser descrito via um operador integral obteremos automaticamente uma forma simples de calcular seu traço.

Definição 10.2. Um operador integral limitado \mathcal{K} é dito de Hilbert-Schmidt se $\mathcal{K}^* \mathcal{K}$ é trace class.

Proposição 10.4. *Um operador integral \mathcal{K} em $L^2(\mathbb{R}^d)$ com núcleo $K \in L^2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ é de Hilbert-Schmidt, e*

$$\text{tr} \mathcal{K}^* \mathcal{K} = \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} |K(x, y)|^2 dx dy.$$

Referimos o leitor a [14] para maiores detalhes sobre operadores do tipo Hilbert-Schmidt.

O valor $\sum_{k \in \mathbb{N}} \langle e_k, A(e_k) \rangle$, denotado por $\tau(A)$ é chamado neste caso de traço A .

Um espaço de Hilbert é separável se ele admite uma conjunto ortonormal completo (enumerável).

Definição 10.3. Um operador autoadjunto A agindo num espaço de Hilbert separável \mathcal{H} é chamado Hilbert-Schmidt (ver [14]), se a soma

$$\sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k^2$$

converge.

Teorema 10.5. Um operador A definido num espaço de Hilbert separável \mathcal{H} é Hilbert-Schmidt, se e só se, $A^* A$ é trace class.

Teorema 10.6. Suponha que $\{e_1, e_2, \dots\}$ é um conjunto ortonormal em \mathcal{H} . Se

$$A(\cdot) = \sum_k |e_k \rangle \lambda_k \langle e_k| \cdot \rangle,$$

onde $\lambda_k \geq 0$, $\text{tr}(A) < \infty$, e A_0 é um operador limitado, então $A_0 A$ é trace class.

Considere V o conjunto dos operadores trace class no espaço de Hilbert $\mathcal{L}^2(M, \mathbb{C})$ com norma $|u|_1 = \text{trace} \sqrt{u^* u} = \text{tr}(\sqrt{u^* u})$. Fica assim definido um espaço vetorial completo (ver [38]). Note que mesmo que u não seja positivo, temos que $u u^*$ está bem definido, é positivo e tem raiz quadrada. Denote por K o conjunto dos operadores trace class. Note que se $u \in K$, então $\text{tr}(u) = |u|_1$. Lembre que $\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$. Sabemos que se $u \in K$ então ele é operador densidade no caso em que $\text{tr}(u) = 1$.

Note que $\text{tr} : V \rightarrow \mathbb{R}$ é um operador linear.

Seja \mathcal{H} um espaço de Hilbert e V o conjunto dos operadores tipo Hilbert-Schmidt com a norma $|A|_2 = \sqrt{\text{tr}(A^* A)}$.

Defina $\langle A, B \rangle = \text{tr}(A^* B)$ para $A, B \in V$. São válidas quase todas as propriedades para que \langle, \rangle seja produto interno. (ver seção 6 em [114])

É natural considerar a seguinte analogia: os operadores trace class (com a norma $|\cdot|_1$) correspondem ao espaço \mathcal{L}^1 e os operadores Hilbert-Schmidt (com a norma $|\cdot|_2$) ao espaço \mathcal{L}^2 .

Lembramos que um conjunto C num espaço vetorial é um cone se cada elemento $x \in C$ é tal que toda vez que o escalar $\lambda > 0$, então λx está também em C .

O conjunto K de operadores positivos é um cone (ver [38]).

Proposição 10.7. [66] *Todo operador trace-class num espaço de Hilbert é tipo Hilbert-Schmidt.*

Capítulo 11

Mecânica Estatística Quântica

Existe uma generalização natural da Mecânica Estatística ao cenário dos sistemas quânticos (ver por exemplo [38] [123] [127] [211] [218]). As medidas de Gibbs vão corresponder aos estados KMS.

Primeiro, para motivar o problema no cenário quântico apresentaremos o modelo mais simples que ocorre na Mecânica Estatística. Considere um sistema físico com estados $\{1, \dots, n\}$, e sejam U_1, \dots, U_n as energias desses estados, respectivamente. Suponha que colocamos o sistema em contato com uma fonte de calor muito maior, que está a uma temperatura T . Sendo assim, a energia irá transitar entre o sistema original e a fonte de calor, e a temperatura T permanecerá constante, pois a fonte tem ordem de grandeza muito maior que o nosso sistema. O problema físico que estamos considerando não é determinístico, e nós podemos apenas falar da probabilidade de um certo estado fixo, digamos j , ocorrer, onde $j \in \{1, 2, \dots, n\}$. Após esperar que o sistema se encontre em equilíbrio, se realizarmos uma sequência de observações, notaremos que o estado j irá ocorrer numa determinada proporção de vezes.

Por exemplo, se fizermos 1000 observações e em 112 delas aparece o estado 2, diremos que existe evidência de que 2 tem probabilidade $P_2 = \frac{112}{1000}$.

Então o que queremos saber, para cada j , é o valor dessa proporção quando o número de observações vai a infinito. É um fato conhecido da Mecânica Estatística (a partir de observações do fenômeno físico) que a probabilidade P_j de que o estado j ocorra é dado pela **distribuição de Gibbs**:

$$P_j = \frac{e^{-BU_j}}{\sum_{i=1}^n e^{-BU_i}} \quad j \in \{1, \dots, n\},$$

onde $B = \frac{1}{kT}$ e k é uma constante, chamada **constante de Boltzmann**.

Uma formulação variacional do que foi dito acima pode ser feita da seguinte maneira. Seja

$$F(p_1, \dots, p_n) = - \sum_{i=1}^n p_i \log p_i - \sum_{i=1}^n p_i BU_i$$

definida no simplexo em \mathbb{R}^n dado por

$$\Lambda = \left\{ (p_1, \dots, p_n) : p_i \geq 0, i \in \{1, \dots, n\}, \sum_{i=1}^n p_i = 1 \right\}$$

Usando multiplicadores de Lagrange, podemos mostrar que o máximo de F no simplexo Λ é obtido em

$$P_j = \frac{e^{-BU_j}}{\sum_{i=1}^n e^{-BU_i}} \quad j \in \{1, \dots, n\},$$

ou seja, de acordo com o valor P_j dado acima.

A função

$$S(p_1, \dots, p_n) = - \sum_{i=1}^n p_i \log p_i$$

é a **entropia** da distribuição (p_1, \dots, p_n) . Defina

$$U(p_1, \dots, p_n) = - \sum_{i=1}^n p_i U_i$$

como sendo a **energia média**. Então podemos dizer que a distribuição de Gibbs maximiza o valor

$$S(p_1, \dots, p_n) + BU(p_1, \dots, p_n)$$

Nesse contexto, a expressão $S + BU$ é o que chamaremos de **energia livre**. Logo, podemos dizer que a natureza maximiza a energia livre. Quando fazemos a temperatura T tender a $+\infty$, isto é, se B tender a 0, vamos nos aproximar de um problema em que apenas se maximiza a entropia.

Alternativamente, podemos também dizer que o estado de Gibbs minimiza $-(S + BU)$.

Na seção 2.12 de [189] vamos descrever um exemplo interessante em que a teoria acima é descrita com bastante detalhes.

Após a análise do sistema mais simples como o descrito acima, vamos considerar sua generalização ao caso quântico. A teoria que trata deste assunto se chama Mecânica Estatística Quântica [38].

Definição 11.1. Dado um operador densidade $\rho = \sum_n p_n P_{\varphi_n}$ definimos a entropia de von Neumann de ρ como

$$S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log \rho),$$

onde $\log \rho$ é o operador

$$\log \rho = \sum_n (\log p_n) P_{\varphi_n}.$$

Podemos escrever de forma alternativa

$$S(\rho) = -\sum_n p_n \log p_n.$$

A entropia de um estado puro (um operador projeção) é sempre nula, ou seja, a menor possível.

No caso bidimensional um ρ da forma $\rho = 1/2 P_{\psi_1} + 1/2 P_{\psi_2}$, onde P_{ψ_1} e P_{ψ_2} são operadores projeção, é tal que sua entropia $\log 2$ é máxima.

Outros conceitos de entropia são descritos na literatura (por exemplo em [218] e [19]).

Vamos supor que o sistema quântico em consideração esta sob a ação de um Hamiltoniano \mathbf{H} .

Desta forma, dado um operador densidade ρ , o seu valor esperado é denotado por $E(\rho) = \text{Tr}(\mathbf{H}\rho) = \langle \mathbf{H} \rangle_\rho$.

Definição 11.2. Fixada uma temperatura T , a energia livre de Helmholtz do estado ρ é por definição

$$F_T(\rho) = E(\rho) - TS(\rho).$$

O operador de equilíbrio à temperatura T para \mathbf{H} seria o ρ que minimiza tal $F_T(\rho)$ entre todos os possíveis operadores densidade.

Pode-se mostrar (ver prova ao fim desta seção) que o ρ_T que minimiza a energia livre de Helmholtz é dado por

$$\rho_T = \frac{1}{Z(T)} e^{-\frac{1}{T}\mathbf{H}},$$

onde, $Z(T) = \text{Tr}(e^{-\frac{1}{T}\mathbf{H}})$. Naturalmente, se exige que o este traço esteja bem definido. Como veremos (mais abaixo nesta seção) no caso do oscilador harmônico, isto de fato acontece.

Referencias abrangentes sobre estes assuntos são [38] e [217].

Definição 11.3. A expressão $\frac{1}{Z(T)} e^{-\frac{1}{T}\mathbf{H}}$ é denominada de estado (operador) KMS (ou de Gibbs) à temperatura T para o operador Hamiltoniano \mathbf{H} . Note que $\frac{1}{Z(T)} e^{-\frac{1}{T}\mathbf{H}}$ é um operador densidade.

É usual a notação $\beta = \frac{1}{T}$ e assim considerar o operador $e^{-\beta\mathbf{H}}$ normalizado pelo seu traço.

Assim, o operador de equilíbrio à temperatura T para \mathbf{H} é o estado de Gibbs à temperatura T para \mathbf{H} .

Note que se H fosse diagonal da forma

$$H = \begin{pmatrix} U_1 & 0 \\ 0 & U_2 \end{pmatrix},$$

onde U_1, U_2 são reais, então $\frac{1}{Z(T)} e^{-\frac{1}{T}\mathbf{H}}$, descreve a probabilidade com pesos

$$P_1 = \frac{e^{-\frac{1}{T}U_1}}{e^{-\frac{1}{T}U_1} + e^{-\frac{1}{T}U_2}}, \quad P_2 = \frac{e^{-\frac{1}{T}U_2}}{e^{-\frac{1}{T}U_1} + e^{-\frac{1}{T}U_2}},$$

através de

$$\rho_T = \frac{1}{Z(T)} e^{-\frac{1}{T}\mathbf{H}} = \begin{pmatrix} \frac{e^{-\frac{1}{T}U_1}}{e^{-\frac{1}{T}U_1} + e^{-\frac{1}{T}U_2}} & 0 \\ 0 & \frac{e^{-\frac{1}{T}U_2}}{e^{-\frac{1}{T}U_1} + e^{-\frac{1}{T}U_2}} \end{pmatrix}$$

A entropia deste operador é dada por $-P_1 \log P_1 - P_2 \log P_2$.

Na Mecânica Quântica as inferências desempenham papel fundamental. Como vemos, o cenário da Mecânica Estatística Clássica está contido neste através das matrizes diagonais.

Vamos elaborar mais sobre este tópico na seções 2.7 e 2.12 de [189].

Vamos apresentar um exemplo interessante agora.

Considere o operador Hamiltoniano $\mathbf{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \mathcal{X}^2$ obtido da quantização do oscilador harmônico.

Sabemos que \mathbf{H} tem autovalores da forma $(n + 1/2)\hbar\omega$. Os autovalores de $e^{-\beta\mathbf{H}}$ são da forma $e^{-(n+1/2)\beta\hbar\omega}$.

Assim,

$$\text{traço } e^{-\beta\mathbf{H}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega} = \frac{e^{-(1/2)\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}$$

é finito se $\beta > 0$.

Desta forma fica bem definido

$$C = \frac{e^{-\beta\mathbf{H}}}{\text{traço } e^{-\beta\mathbf{H}}},$$

que tem traço 1 e é positivo.

O resultado acima exhibe um exemplo de grande importância na teoria da Mecânica Estatística Quântica.

Vamos mostrar agora que dado o Hamiltoniano \mathbf{H} , o operador densidade que minimiza a energia livre de Helmholtz é dado por

$$\rho_T = \frac{1}{Z(T)} e^{-\frac{1}{T}\mathbf{H}}.$$

Seja ρ uma matriz densidade fixada, então sua entropia de von Neumann é dada por

$$0 \leq h(\rho) = -\text{tr}(\rho \log \rho).$$

Vamos mostrar que fixado um operador autoadjunto B agindo em \mathbb{C}^n então a função F dada por

$$X \rightarrow F(X) = \text{tr}(XB) + h(X)$$

é maximizada por $X_0 = \frac{e^B}{\text{tr}(e^B)}$.

X_0 é chamado de operador densidade KMS associado ao operador B .

A partir do Lemma 4 section 3 in [129] (ou, Theorem 11.9 em [232]) obtemos: se $f(z)$ é analítica na variável z , então se A e B são autoadjuntas agindo em \mathbb{C}^n temos

$$\frac{d}{dt} \text{tr} f(A + tB)|_{t=t_0} = \text{tr}(B f'(A + t_0 B)).$$

Fixado um operador autoadjunto B considere uma matriz densidade variável X e a função F dada por

$$X \rightarrow F(X) = \text{tr}(XB) + h(X) \in \mathbb{R}.$$

Na notação anterior teremos que este B vai corresponder a $B = -\beta \mathbf{H}$.

Qual o valor máximo de $F(X)$ quando X varia nas matrizes densidade? Este valor máximo é denominado de pressão de B .

Como o conjunto dos operadores densidade é compacto existe o supremo. Poderiam ocorrer autovalores nulos para tal maximizante? Vamos mostrar que o maximo é realizado por uma matriz densidade X_0 com autovalores estritamente positivos.

De fato, considere P_1, P_2, \dots, P_n operadores projeção tais que

$$\sum_{j=1}^n P_j = I.$$

Dados $0 \leq \lambda_j, j = 1, 2, \dots, n$, tais que, $\sum_{j=1}^n \lambda_j = 1$, então temos que $\sum_{j=1}^n \lambda_j P_j$ descreve um operador densidade geral.

Note que

$$F\left(\sum_{j=1}^n \lambda_j P_j\right) = \sum_{j=1}^n \lambda_j \text{tr}(P_j B) - \sum_{j=1}^n \lambda_j \log(\lambda_j).$$

Portanto, temos para um i fixado que

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_i} F\left(\sum_{j=1}^n \lambda_j P_j\right) |_{\lambda_i=0} = (\text{Tr}(P_i B) - 1) - \log(\lambda_i) |_{\lambda_i=0} = \infty.$$

Desta forma não podemos ter $\lambda_i = 0$, $i = 1, 2, \dots, n$, para o operador densidade maximizante.

Assim, por argumentos de compacidade existe tal X_0 com autovalores todos positivos.

Como caracterizar X_0 ?

Considere variações de X_0 dada por $X_0 + tZ$, onde Z é autoadjunta com traço zero e $t \in \mathbb{R}$ é pequeno. Note que como X_0 tem todos autovalores positivos então para t pequeno $X_0 + tZ$ é operador densidade.

Na derivação de

$$\frac{d}{dt}F(X_0 + tZ) = \frac{d}{dt}tr((X_0 + tZ)B) + h(X_0 + tZ)$$

o primeiro termo é fácil de controlar. De fato, $tr((X_0 + tZ)B) = tr(X_0B) + t tr(ZB)$, e assim $\frac{d}{dt}tr((X_0 + tZ)B) = tr(ZB)$.

Para o outro termo note que $f(z) = z \log(z)$ tem derivada $1 + \log(z)$.

Em função da maximização de X_0 e pelo resultado mencionado acima, para um Z com traço zero qualquer, temos que

$$0 = \frac{d}{dt}F(X_0 + tZ)|_{t=0} = tr(ZB) - tr(Z(I + \log(X_0))) = \\ tr(ZB) - tr(Z \log(X_0)).$$

Fica assim caracterizada a matriz X_0

Isto implica que $B - \log X_0 = cI$, para algum c real. De fato, considere a decomposição espectral de $C = B - \log X_0$. Se houvessem dois autovalores distintos de C , digamos λ_i e λ_j , considere Z (com mesma decomposição em autovetores) e tal que é igual a multiplicação por 1 e -1 nos correspondentes autovetores (i e j) que são associados aos dois autovalores distintos λ_i e λ_j . Assuma que Z é tal que tem autovalores zero associados aos outros autovetores de $B - \log X_0$ (distintos de i e j). Neste caso Z tem traço zero, mas $tr(ZC) = \lambda_i - \lambda_j \neq 0$. Contradição. Logo, $B - \log X_0 = cI$.

Portanto, $X_0 = \frac{e^{B-cI}}{tr(e^{B-cI})} = \frac{e^B}{tr(e^B)}$.

Capítulo 12

Uma generalização da Teoria de Hamilton-Jacobi

Seja $\psi_t : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$, que satisfaz a equação de Schrödinger i.e.,

$$i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathbf{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2\mathbf{m}} \Delta \psi + \mathbf{V}(\mathbf{x})\psi.$$

Vamos considerar o sistema indexado pela massa $m > 0$ e também por \hbar .

Vamos escrever $\psi(t, x) = \psi_{m, \hbar}(t, x)$ na forma polar

$$\psi(t, x) = a(t, x) e^{\frac{i}{\hbar} S(t, x)} = a_{m, \hbar}(t, x) e^{\frac{i}{\hbar} S_{m, \hbar}(t, x)},$$

onde $a = a_{m, \hbar}$ e $S = S_{m, \hbar}$ tomam apenas valores reais e $m > 0$. No tempo t o termo $|a_{m, \hbar}|^2$ descreve a densidade da partícula quântica de massa m e o termo $S_{m, \hbar}$ a fase da partícula quântica.

Dado $S(t, x)$ denotamos $\nabla S(t, x) = \left(\frac{\partial S(t, x)}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial S(t, x)}{\partial x_n} \right)$

Teorema 12.1. $\psi_t = a e^{\frac{i}{\hbar} S} = a_t e^{\frac{i}{\hbar} S_t}$, satisfaz a equação de Schrödinger, se e só se,

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{|\nabla S|^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta a}{a}, \quad (12.1)$$

e

$$\frac{\partial(a^2)}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\frac{a^2 \nabla S}{m}\right) = 0. \quad (12.2)$$

Demonstração:

Para demonstrar o resultado desejado, note primeiro que

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{1}{a} \frac{\partial a}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t}\right) \psi,$$

e

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial \psi}{\partial x_n}\right) = \nabla \psi = \left(\frac{\nabla a}{a} + \frac{i}{\hbar} \nabla S\right) \psi.$$

Disto segue que

$$\Delta \psi = \left(\frac{\hbar^2 \Delta a}{a} + i \hbar \Delta S + 2i \hbar \frac{\langle \nabla a, \nabla S \rangle}{a} - \frac{i}{\hbar^2} |\nabla S|^2\right) \psi.$$

Substituindo estas expressões na equação de Schrödinger obtemos

$$\begin{aligned} i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \left(\frac{i \hbar \partial a}{a} - \frac{\partial S}{\partial t}\right) \psi = \\ & \left[-\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar^2 \Delta a}{a} + i \hbar \Delta S + 2i \hbar \frac{\langle \nabla a, \nabla S \rangle}{a} - |\nabla S|^2\right) + V\right] \psi. \end{aligned}$$

Após dividir as duas expressões acima por ψ , e, ao igualar a parte real e imaginária de cada um dos lados obtemos

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{|\nabla S|^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta a}{a},$$

e

$$i \hbar \frac{1}{a} \frac{\partial a}{\partial t} = -i \hbar \frac{1}{2m} \Delta S - 2i \hbar \frac{1}{2m} \frac{\langle \nabla a, \nabla S \rangle}{a}.$$

Multiplicando a última expressão por $\frac{2a^2}{i\hbar}$, obtemos

$$\frac{\partial(a^2)}{\partial t} = -\operatorname{div}\left(\frac{a^2 \nabla S}{m}\right).$$

Desta forma fica demonstrada a afirmação acima. ■

Este par de equações que mencionamos acima pode ser obtido via um problema variacional e alguns entendem que tal procedimento esta dentro da linha da assim chamada Mecânica de Bohm (ver [270]). Na seção 2.18 de [189] vamos considerar tal questão.

Este ponto de vista da Mecânica Quântica algumas vezes é denominado de interpretação hidrodinâmica (ver [128]). Está relacionado com a interpretação estocástica de E. Nelson (ver [216] and [277])

Para determinar uma solução $S(x, t)$, $a(x, t)$ é necessario - ao menos - fixar uma condição inicial $S(0, x)$, $a(0, x)$ onde $\int a(0, x)^2 dx = 1$.

Note que vai seguir do resultado acima que se assumirmos que ψ_t é estacionária, ou seja, está na forma

$$\psi_t(x) = a(x)e^{\frac{i}{\hbar} [S(x) - Et]} = a_m(x)e^{\frac{i}{\hbar} [S_m(x) - Et]},$$

onde E é constante, então ψ_t satisfaz a equação de Schrödinger, se e só se, para todo x vale

$$-E + \frac{|\nabla S(x)|^2}{2m} + V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta a(x)}{a(x)},$$

e

$$\operatorname{div} \left(\frac{a^2(x) \nabla S(x)}{m} \right) = 0.$$

A última expressão indica que a densidade $a(x)^2$ não depende de t .

Observamos que a hipótese de estacionaridade implica assumir que $a(x)e^{\frac{i}{\hbar} S(x)}$ seja um autovetor de \mathbf{H} associado ao autovalor E .

Mais detalhes sobre a equação de Hamilton-Jacobi em Mecânica Quântica podem ser encontrados em [72].

Exemplo: No caso unidimensional podemos tomar acima $S = 0$, e, então basta encontrar a função real $a(x)$ tal que

$$-E + V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta a(x)}{a(x)}.$$

Esta equação é equivalente a equação linear de segunda ordem

$$\frac{d^2}{dx^2} a(x) - \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) a(x) = 0.$$

Como exigimos que $\int a(x)^2 dx = 1$, temos que a vai a zero quando x vai a mais infinito e a menos infinito.

A equação acima tem sempre solução $a(x)$ sob hipóteses razoáveis sobre V . A condição de que a vai a zero quando x vai a mais infinito e a menos infinito fixa condições de fronteira que determinam os possíveis valores de E .

Assim, no caso unidimensional, este procedimento mostra como calcular autofunções de \mathbf{H} . Na seção 1.6 ao fim do exemplo 3 analisamos tal caso com detalhes.

Vamos analisar agora com mais cuidado no caso geral a expressão

$$\frac{\partial(a(t, x)^2)}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\frac{a(t, x)^2\left(\frac{\partial S(t, x)}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial S(t, x)}{\partial x_n}\right)}{m}\right) =$$

$$\frac{\partial(a^2)}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\frac{a^2 \nabla S}{m}\right) = 0.$$

Em dinâmica de fluidos esta equação descreve a evolução de uma massa fluída com densidade de massa a^2 e que vai se mover no ponto x na direção do vetor tangente $\nabla S(x)$.

A conservação de densidade de massa nos dá a expressão

$$\operatorname{div}\left(\frac{a^2 \nabla S}{m}\right) = 0.$$

Faremos aqui um paralelo com cenário quântico. Lembre que na Mecânica Quântica $a(t, x)^2 = a_t(x)^2$ vai descrever a probabilidade de encontrar em x a partícula no tempo t numa certa região espacial dada. Assim esta densidade vai evoluir ao longo do tempo seguindo a direção do gradiente de S (no tempo t) que é a parte ondulatória da função de onda.

Assim, a evolução da distribuição de massa na Mecânica de Fluidos possui um paralelo com a evolução da probabilidade de encontrar a partícula numa certa região na Mecânica Quântica. Vamos elaborar um pouco mais sobre isto.

Teorema 12.2. *Seja uma família de difeomorfismos $T_t : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $t \in \mathbb{R}$, onde $T_0 = I$, e, $v_t(x)$, que satisfaz*

$$v_t(T_t(x)) = \frac{dT_t(x)}{dt},$$

$x \in \mathbb{R}$, $t \in \mathbb{R}$. Seja, uma densidade inicial $f(x)$, e, ρ_t a evolução temporal desta densidade ao longo do fluxo definido pela família de difeomorfismos T_t , isto é, para qualquer função diferenciável com suporte compacto φ e qualquer t , temos que

$$\int \varphi(x) \rho_t(x) dx = \int \varphi(T_t(x)) f(x) dx.$$

Note que $\rho_0(x) = f(x)$ para todo x .

Então vale a equação do transporte

$$\frac{d}{dt} \rho_t + \frac{d}{dx} (v \rho_t) = 0.$$

Demonstração:

Sem perda de generalidade (basta tomar limites após obtido o resultado desejado) se pode assumir que φ tem suporte compacto.

Note que para todo x

$$\frac{d}{dt}(\varphi \circ T_t) = \left[\frac{d}{dx} \varphi(T_t(x)) \right] \frac{dT_t(x)}{dt} = \left[\frac{d}{dx} \varphi(T_t(x)) \right] v_t(T_t(x)).$$

Assim, como podemos passar a derivada para dentro da integral

$$\begin{aligned} \int \varphi(x) \frac{d}{dt} \rho_t(x) dx &= \frac{d}{dt} \int \varphi(x) \rho_t(x) = \frac{d}{dt} \int \varphi(T_t(x)) f(x) dx = \\ &= \int \left[\frac{d}{dx} \varphi(T_t(x)) \right] v_t(T_t(x)) f(x) dx = \int \left[\frac{d}{dx} \varphi(x) \right] v_t(x) \rho_t(x) dx = \\ &= - \int \varphi \frac{d}{dx} [v_t(x) \rho_t(x)] dx. \end{aligned}$$

Na última passagem usamos integração por partes, e, ainda, o fato φ tem suporte compacto.

Como a afirmação vale para todo φ temos finalmente que

$$\frac{d}{dt} \rho_t = - \frac{d}{dx} (\rho_t v).$$

■

Acima $v = \nabla S$ na equação do transporte anteriormente obtida.

A prova do resultado acima vale também para uma família de difeomorfismos $T_t : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. Suponha que $v : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ seja um campo de vetores autônomo e considere o fluxo Φ_t , $t \in \mathbb{R}$, associado a equação diferencial $x' = v(x)$ (ver [75]). Neste caso as hipóteses acima estão satisfeitas e, fixada uma densidade inicial ρ_0 , então a evolução temporal desta densidade pelo fluxo é dada pela equação de transporte para ρ_t , $t \in \mathbb{R}$.

No caso da equação dada por (12.1) e (12.2) para as funções a e S podemos então interpretar, no caso unidimensional, a relação de $S(t, x)$ com $\rho_t = a_t^2$ (que aparecem na expressão da função de onda) da seguinte forma: se $f(x) = a_0^2(x)$ é a condição inicial, e, T_t é o fluxo que vai definir a correspondente evolução temporal da densidade $a_t^2 = \rho_t$, via a equação de Schrödinger, então

$$\frac{\partial(a^2)}{\partial t} + \frac{d}{dx} \left(\frac{a^2 \frac{d}{dx} S}{m} \right) = 0,$$

significa que $\frac{d}{dt} T_t(x) = v_t(x) = \frac{\frac{d}{dx} S(t, x)}{m}$.

Ou seja, no caso n -dimensional $\frac{\nabla_x S(t, x)}{m}$ aponta na direção da variação da densidade de probabilidade a_t^2 no ponto x .

Definição 12.1. A equação diferencial

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{|\nabla S|^2}{2m} + V(x) = 0, \quad (12.3)$$

é conhecida em Mecânica Clássica como a equação de Hamilton-Jacobi para a ação $S(t, x)$.

Esta equação não envolve o termo $a(t, x)$.

É natural supor que $S(x, t)$ é da forma $S(x, t) = -Et + S(x)$ e isto simplifica equação acima: obtemos assim a equação de Hamilton-Jacobi estacionária

$$\frac{|\nabla S(x)|^2}{2m} + V(x) = E, \quad (12.4)$$

Esta equação não envolve o termo $a(x)$.

Em geral não existe uma função diferenciável S que solucione tal equação (12.4). Referimos o leitor a [7], [2] e a seção 3 em [184] para resultados gerais sobre esta equação e sua relação com Mecânica Clássica.

Comentários sobre a equação de Hamilton-Jacobi na Mecânica Clássica: para determinar a solução $S(x, t)$ é necessario fixar uma condição inicial $S_0(x) = S(0, x)$. Mesmo supondo $S_0(x)$ de classe C^∞ em x , a propriedade que, para um dado sistema mecânico clássico, se tenha uma evolução $S(t, x)$, onde S_t esta definida e diferenciável em todo \mathbb{R}^n e para todo t , é em geral forte demais. Além disso a equação diferencial associada a $v_t = \nabla S_t$ não é muitas vezes autonoma. O aparecimento de pontos de cáustica - em algum ponto $t > 0$ - (ver [249], [5], [2], [205] ou seção 3 em [184]) impõe restrições ao problema.

A existencia de uma função Lipchitz $S : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ solucionando (12.3) (que tem derivada em quase todo ponto) e nos pontos x onde tem derivada vale

$$\frac{|\nabla S(x)|^2}{2m} + V(x) = E,$$

se chama do "cell problem". A existência de tal solução S é descrita em [183] e [87].

É natural estudar a existencia de soluções S definidas em "quase todo espaço" relaxando a hipótese (de ter derivada em todos os pontos) para apenas assumir que a derivada ∇S existe (e satisfaz a equação acima) fora de um conjunto de medida de Lebesgue zero. Resultados nesta direção estão descritos na assim chamada Teoria KAM fraca (ver [93], [56] e [32]) [9], [84], [190], [116]).

Vamos continuar a analisar a expressão geral

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(t, x)}{\partial t} + \frac{((\frac{\partial S(t, x)}{\partial x_1})^2 + \dots + (\frac{\partial S(t, x)}{\partial x_n})^2)}{2m} + V(x) = \\ \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{|\nabla S|^2}{2m} + V(x) = \\ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta a}{a} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(\frac{\partial^2 a(t, x)}{\partial x_1^2} + \dots + (\frac{\partial^2 a(t, x)}{\partial x_n^2}))}{a(t, x)}. \end{aligned}$$

Alguns autores consideram a condição $\hbar \rightarrow 0$ como a aproximação da Mecânica Quântica ao cenário da Mecânica Clássica (ver [122]). Mais precisamente, para t fixo, a distribuição de probabilidade de $|\psi_t(x)|^2$ - onde ψ_t satisfaz a equação de Schrodinger com \hbar variável - deveria descrever, de alguma forma, um sistema mecânico clássico.

Não há de nossa parte nenhum reparo a este formalismo do ponto de vista matemático. Mas, na nossa opinião, não faz muito sentido do ponto de vista da Física, pois em um momento \hbar é uma constante fundamental da teoria e em outro é uma variável. No nosso modesto entendimento, este ponto de vista não é corroborado por algum princípio físico convincente conforme discussão em [156]. Na verdade uma constante ϵ "dimensionless", como explicado por C. Sparber em [263], é que corresponde ao formalismo matemático correto fazendo $\epsilon \rightarrow 0$ no limite semiclassico na equação

$$i \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t}(t, x) = -\frac{\epsilon^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x^2} + V(x) \psi(t, x).$$

Excelentes textos matemáticos tratam do assunto (ver [122], [162], [72] e [284]). Abordamos o assunto em algumas seções (por exemplo nas seções 2.10 e 2.14 de [189]).

De qualquer forma no caso estacionário nos pareceria fazer mais sentido considerar um estado quântico como dependente da massa e fazer o limite (semi-clássico) quando a massa e a energia (auto-valor grande) vão a infinito com \hbar fixo.

Por exemplo, na excelente exposição [138] and [139] observamos que o tal limite assintótico pode ser entendido como supondo que a massa vai a infinito. Neste trabalho é analisado a medida assintótica no limite semiclassico do ground state para um potencial diferenciável numa variedade Riemanniana.

O assim chamado cell problem esta naturalmente relacionado com questões de Limite semi-clássico. Referencias em que se analisam tais questões do ponto de vista da Teoria de Aubry-Mather (ver [93]) são [9], [84], [190], [116].

Em algumas seções de [189] (como por exemplo quando consideramos a integral de Feynmann) vamos analisar então o limite $\hbar \rightarrow 0$ do ponto de vista estritamente matemático. Observamos que $a_{m,\hbar}$ e $S_{m,\hbar}$ são soluções de uma equação diferencial que depende conjuntamente dos parâmetros m, \hbar .

Desta forma, não se pode afirmar sem maiores cuidados (de forma simplista) que quando $\hbar \rightarrow 0$, temos que as soluções da equação

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{|\nabla S|^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta a}{a},$$

vão ter como limite as soluções da equação (12.3) acima. A expressão

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta a_{m,\hbar}}{a_{m,\hbar}}(t, x),$$

quando $\hbar \rightarrow 0$, pode não ir a zero se não for possível controlar o crescimento de $a_{m,\hbar}$ e $S_{m,\hbar}$ com \hbar . Não estamos afirmando que não é possível controlar $a_{m,\hbar}$ e $S_{m,\hbar}$, apenas alertamos que é necessário algum tipo de cuidado nas hipóteses sobre como variam (ou, não) m , \hbar , etc... (ver seção 3.2 e cap 4 em [9] ou [72], [86], [84], [122], [284] e [116]).

Uma classe de problemas associado a este limite assintótico é algumas vezes tratado pelo método WKB e das expansões asintóticas (ver seção 6.6 em [50], ou [26], ou [130] and [162]).

O limite semiclássico considerando um intervalo de tempo $[0, T]$ fixado é abordado de outra forma na seção 2.15 de [189] (em particular, fazemos algumas considerações pertinentes no último parágrafo desta mencionada seção).

Faremos a seguir alguns considerações heurísticas seguindo este ponto de vista. Assim, a expressão

$$\frac{\partial S_{m,\hbar}}{\partial t} + \frac{|\nabla S_{m,\hbar}|^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta a_{m,\hbar}}{a_{m,\hbar}},$$

indica que que quando $\hbar \rightarrow 0$, a solução $S_{m,\hbar}(t, x)$ fica "parecida" com a ação clássica $S_\infty(t, x)$ (que é solução da equação (12.3)).

No limite semiclássico obteríamos (otimisticamente) então o par de equações em a_∞ e S_∞

$$\frac{\partial S_\infty}{\partial t} + \frac{|\nabla S_\infty|^2}{2m} + V = 0,$$

e

$$\frac{\partial(a_\infty^2)}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\frac{a_\infty^2 \nabla S_\infty}{m}\right) = 0.$$

Seja S_∞ a ação clássica para o Hamiltoniano autônomo clássico $H(x, p) = \frac{|p|^2}{2m} + V$. Se assumirmos, via separação de variáveis, que $S_\infty(x, t) = W(x) - Et$, obtemos a equação de Hamilton-Jacobi na forma

$$\frac{|\nabla W(x)|^2}{2m} + V(x) = E,$$

e a equação de transporte

$$\operatorname{div} \left(\frac{a_\infty^2 \nabla W}{m} \right) = 0.$$

Note que foi essencial aqui supor que o Hamiltoniano é autônomo.

No caso em que o potencial é nulo obtemos a equação da eikonal [184]: fixado E , determine W tal que

$$\frac{|\nabla W(x)|^2}{2m} = E.$$

O nível de energia E é o conjunto de pontos (x, p) tais que vale

$$\frac{|p|^2}{2m} + V(x) = E.$$

A x -projecção do nível de energia E é o conjunto dos x tais que existe p tal que $\frac{|p|^2}{2m} + V(x) = E$. Na figura 7.1 pode se observar no caso unidimensional os possíveis valores x que podem ser atingidos quando esta fixo um certo nível de energia E . Fixado um nível de energia E sejam $x_a^E < x_b^E$ os extremos deste intervalo.

É fácil ver, pelo Teorema de Conservação da Energia total, que

$$W(x) = \int_{x_a}^x \sqrt{2m[E - V(y)]} dy$$

satisfaz a equação de Hamilton-Jacobi

$$\frac{|\nabla W(x)|^2}{2m} + V(x) = E.$$

Note que $W(x) = - \int_{x_a}^x \sqrt{2m[E - V(y)]} dy$ também satisfaz a equação.

No limite semiclássico, quando $\hbar \rightarrow 0$, seria natural esperar que a S^\hbar , associada a cada \hbar , vá convergir a esta W .

Nos pontos x_a e x_b a função W deixa de ser diferenciável. Algumas vezes se chama tais pontos de pontos de dobra. A função W não está assim (ao menos de maneira natural) definida de forma diferenciável em toda a reta real. As soluções KAM fracas descrevem uma maneira alternativa de tratar com tais patologias [56].

W é chamada de solução KAM fraca da equação de Hamilton-Jacobi se W é diferenciável fora de um conjunto de medida de Lebesgue 0 na x -projeção do nível de energia E , e, vale $\frac{|\nabla W(x)|^2}{2m} + V(x) = E$ (onde definido) [92] [56]. Neste caso, sempre existe solução KAM fraca da equação de Hamilton-Jacobi (sob algumas condições bem gerais sobre V).

A sigla KAM se refere a Kolomogorov, Arnold and Moser que deram contribuições muito importantes na formalização desta Teoria.

Fixado m e o correspondente a_m (obtido da equação de Schrödinger) considere um novo potencial $V_m(x) = V(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta a_m(x)}{a_m(x)}$.

Definição 12.2. $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta a(x)}{a(x)}$ é chamado de potencial quântico associado a \mathbf{H} e ao estado $\psi = a e^{\frac{i}{\hbar} S}$.

A seguir vamos considerar um novo Hamiltoniano $H_m(x, p)$, definido para (x, p) em $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ dado por

$$H_m(x, p) = \frac{|p|^2}{2m} + V_m(x) = \frac{|p|^2}{2m} + \left[V(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta a_m(x)}{a_m(x)} \right].$$

É fácil ver que a equação de Hamilton-Jacobi em S_m para o Hamiltoniano H_m é a equação

$$\frac{\partial S_m}{\partial t} + \frac{|\nabla S_m|^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta a_m}{a_m}.$$

Vamos fazer agora algumas digressões sobre o ponto de vista de encarar um dado sistema descrito pela Mecânica Quântica como um sistema oriundo da Mecânica Clássica ao qual adicionamos o potencial quântico ao potencial clássico.

Em outras palavras, podemos pensar na existência de um novo potencial $V_{m,\hbar}$ (diferente de V ao adicionar o potencial quântico),

e que este, de certa forma, descreve sob o ponto de vista clássico o cenário quântico.

A ação clássica $S(t, x)$ é descrita da seguinte forma: fixe um ponto $x' \in \mathbb{R}^n$, e, considere uma solução da equação de Hamilton $(x(s), p(s))$, $s \in [0, t]$, tal que,

- 1) $x(0) = x'$
- 2) $x(t) = x$.

Note que o caminho $(x(s), p(s)) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ depende de x e x' , e, que poderia não ser único (mas, fizemos acima a escolha de **uma determinada solução da equação de Hamilton**). Naturalmente será necessário que x e x' estejam na projeção de um mesmo nível de energia.

A seguir defina (ver seção 3.8 em [184])

$$S(t, x) = \int_0^t \left[\langle p(s), \frac{d}{ds}x(s) \rangle - H(x(s), p(s)) \right] ds.$$

Vamos supor que tal função está bem definida para x próximo de x' , para t em uma vizinhança de $t = t'$ fixado, e ainda que S é diferenciável em t e x . Observamos que se pode encontrar tal S num certo domínio de definição [184]. O problema que atrapalha para se obter uma S globalmente definida são os assim chamados pontos conjugados (que aparecem também em Geometria Diferencial) também chamados de pontos de cáustica (vamos considerar tais questões nas seções 2.13, 2.14 e 2.15 de [189]). Referimos o leitor ao exemplo 2.3.1 e também a seção 3 de [184] para maiores discussões sobre o assunto.

No caso do oscilador harmônico, $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$, fixado T e os pontos inicial x e final y a ação ligando

$$S(x, y, T) = \frac{w}{2\text{sen}(wT)} [(x^2 + y^2) \cos(wT) - 2xy].$$

Para cada x' fixo, tal função ação $S(t, x)_{x'} = S(t, x, x')$ satisfaz a equação de Hamilton-Jacobi para o Hamiltoniano H fixado (ver seção 3.9 in [184]). Assim, é natural identificar $S(t, x, x') = S_\infty(t, x, x')$.

Note que $\text{sen}(wT)$ pode se anular quando wT for múltiplo inteiro de π . Nestes pontos temos que $S(x, y, T) = \infty$.

Pode-se demonstrar da mesma forma, que o S_m (satisfazendo a equação clássica de Hamilton-Jacobi) acima descrito também pode

ser obtido via criticalidade de

$$S_m(t, x) = \int_0^t \left[\left\langle p(s), \frac{d}{ds}x(s) \right\rangle - H_m(x(s), p(s)) \right] ds,$$

para (t, x) em uma vizinhança de x' e t' (supondo estarem satisfeitas as hipóteses mencionadas acima) onde H_m incorpora o potencial quântico.

Note que o termo H_m contém a_m . Assim, a afirmação precisa é: uma vez que "tivéssemos" encontrado a_m (que assumimos satisfaz a equação de Shrodinger), então S_m satisfaz a relação acima. No caso quântico, como necessitamos resolver simultaneamente um par de equações em a_m e S_m , a relação acima não é muito efetiva para se encontrar soluções explícitas.

Vamos estender um conceito que já foi descrito anteriormente: fixados x, x', t e t' , então $S(t, t', x, x')$ será definido da seguinte forma: escolha uma solução da equação de Hamilton $(x(s), p(s))$, $s \in [t, t']$, tal que,

- 1) $x(t) = x$
- 2) $x(t') = x'$.

O caminho $(x(s), p(s)) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ depende de t, t', x e x' , e, poderia não ser único (mas, fizemos acima uma escolha). Naturalmente será necessário que x e x' estejam na projeção de um mesmo nível de energia.

A seguir defina a integral da ação (ver seção 3.8 em [184])

$$S(t, t', x, x') = \int_t^{t'} \left[\left\langle p(s), \frac{d}{ds}x(s) \right\rangle - H(x(s), p(s)) \right] ds.$$

Vamos supor que tal função está bem definida para y próximo de x , ainda, y' próximo de x' , para r em uma vizinhança de t , e, r' numa vizinhança de t' . Suponha ainda que S é diferenciável em t, t' e x, x' . Observamos que se pode encontrar tal S num certo domínio de definição [184].

Uma ilustração pictórica da interpretação de $S(t, t', x, x')$ é a seguinte: um jogador de tênis recebe a bolinha no tempo t na posição x (do seu lado da quadra de tênis) e deseja bater na raquete (isto requer a escolha de um vetor p no tempo t , e, que vai determinar a

trajetória $(q(s), p(s))$ e colocar assim a bolinha de volta na outra parte da quadra de tênis na posição x' e no tempo t' .

Assim, $S(t, t', x, x')$ descreveria a integral da "ação" desta escolha de trajetória da bolinha determinada pelo tenista.

Fixando x', t' , temos que a função $S(t, t', x, x')$ satisfaz a equação de Hamilton-Jacobi, logo, é natural identificar $S = S_\infty$.

Uma outra expressão interessante que envolve S_∞ e a_∞ é a seguinte: se

$$a_\infty^2 = \det \left(\frac{\partial^2 S_\infty}{\partial x \partial x'} \right),$$

então, vale a equação de continuidade

$$\frac{\partial a_\infty^2}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\nabla S_\infty \frac{a_\infty^2}{m} \right) = 0.$$

Vamos considerar (para simplificar) o caso em que x unidimensional e explicar o sentido da afirmação acima.

Teorema 12.3. (*Van Vleck*) *Considere $S_\infty(t, t', y, y')$ como definido acima. Se definirmos a^2 de tal forma que para x' e t' fixos temos que para quaisquer x, t*

$$a_\infty^2(t, x) = \det \left(\frac{\partial^2 S_\infty(t, y, t', x')}{\partial y \partial y'} \right) \Big|_{(t, x, t', x')},$$

então, a^2 satisfaz a equação de continuidade, ou seja, para qualquer (t, x)

$$\frac{\partial a_\infty^2(t, x)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial S_\infty(t, x, t', y')}{\partial x} \frac{a_\infty^2(t, x)}{m} \right) = 0.$$

Demonstração: De fato, note que

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_\infty^2(r, y)}{\partial r} \Big|_{(r=t, x, t', x')} &= \frac{\partial \left(\frac{\partial^2 S_\infty(r, y, t', y')}{\partial y \partial y'} \right)}{\partial r} \Big|_{(r=t, x, t', x')} = \\ &= \frac{\partial^2 \left(\frac{\partial S_\infty(r, y, t', y')}{\partial r} \right)}{\partial y \partial y'} \Big|_{(r=t, x, t', x')} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{\partial^2 \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_\infty(r, y, t', y')}{\partial y} \right)^2 + V(y) \right]}{\partial y \partial y'} \Big|_{(r=t, x, t', x')} = \\
& - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{m} \frac{\partial S_\infty(r, y, t', y')}{\partial y} \frac{\partial^2 S_\infty(r, y, t', y')}{\partial y' \partial y} \right) \Big|_{(r=t, x, t', x')} = \\
& - \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial S_\infty(r, y, t', y')}{\partial y} a^2(r, y) \right) \Big|_{(r=t, x, t', x')}.
\end{aligned}$$

■

Se considerássemos

$$S_m(t, t', x, x') = \int_t^{t'} \left[\langle p(s), \frac{d}{ds} x(s) \rangle - H_m(x(s), p(s)) \right] ds,$$

obteríamos a relação dada pela equação de continuidade, ou seja, para qualquer (t, x)

$$\frac{\partial a_m^2(t, x)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial S_m(t, x, t', y')}{\partial x} \frac{a_m^2(t, x)}{m} \right) = 0.$$

Note que no caso do oscilador harmonico

$$\frac{\partial^2 S_\infty(x, y, t)}{\partial x \partial y} = \frac{-w}{\text{sen}(wt)}.$$

Assim, se t for pequeno, mas não nulo, então $\frac{-w}{\text{sen}(wt)}$ fica finito.

A seção 2.18 [189] trata do assunto considerado acima de um ponto de vista diferente.

Capítulo 13

Distribuições e Transformada de Fourier

Nesta seção vamos abordar brevemente (e de forma informal) alguns aspectos da Teoria das Distribuições sem entrar em muitos detalhes técnicos. Uma boa referência no assunto é a seção 3.4 em [64] (ou, [34], [42]).

O conceito de distribuição, ou, função generalizada em \mathbb{R} , é uma generalização do conceito de função, e, é *preliminarmente* descrito como um funcional linear contínuo que age no espaço das funções $C_0^\infty(\mathbb{R}) = \{g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \text{ com derivadas de todas as ordens, e tal que existe um intervalo } [a, b] \text{ tal que } g \text{ se anula fora de } [a, b]\}$. Para falar em continuidade precisamos de alguma topologia no conjunto $C_0^\infty(\mathbb{R})$ e isto será tratado mais tarde no texto. O conjunto $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ é definido de maneira análoga.

Primeiramente, vejamos como uma função pode ser vista como distribuição (ou função generalizada): dada $f \in C(\mathbb{R})$ limitada,

definimos o funcional associado a f por

$$\mathcal{L}_f : C_0^\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$$

$$\mathcal{L}_f(g) = \int_{\mathbb{R}} f(x)g(x)dx.$$

Assim, estamos substituindo o conceito usual de função, que seria uma lei que associa um valor a cada ponto do domínio, por outro, que envolve a sua ação ao ser integrada contra funções teste g em $C_0^\infty(\mathbb{R})$. Vamos ver que para uma certa classe de funções os dois conceitos se correspondem bijectivamente e de forma natural.

Denotamos por T a aplicação que a cada f associa \mathcal{L}_f . Observamos que T é uma aplicação injetiva quando consideramos as f contínuas. De fato, sejam f_1 e f_2 distintas funções contínuas. Então existe um intervalo $[a, b]$ no qual $f_1 \neq f_2$, digamos que $f_1(x) > f_2(x)$, para todo $x \in [a, b]$ (ou vice-versa). Assim, tomando g uma função em $C_0^\infty(\mathbb{R})$ (contínua por tanto) não negativa, não identicamente nula, mas nula fora do intervalo $[a, b]$, tem-se que

$$(T(f_1) - T(f_2))(g) = \int_{\mathbb{R}} (f_1(x) - f_2(x))g(x)dx > 0.$$

Portanto T é injetiva.

Definição 13.1. O conjunto das distribuições, é descrito como

$$\mathcal{G} = \{L : C_0^\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R} \mid L \text{ é linear e contínuo}\}.$$

Para ser mais rigoroso, ressaltamos que para falar em continuidade (como acima), é preciso especificar um sentido de convergência de sequência $g_n \rightarrow g$, em $C_0^\infty(\mathbb{R})$. Basicamente, isto deveria significar que as derivadas de todas as ordens k de g_n convergem uniformemente para as correspondentes para g quando $n \rightarrow \infty$. Não vamos elaborar mais aqui sobre isto e referimos o leitor (interessado na rigorosa formalização matemática do assunto) para a seção IV parágrafo 5 [57].

Os **espaços de Sobolev** descrevem a formulação matemática precisa para o estudo das funções generalizadas.

Considere a aplicação $\delta_{x_0} : C_0^\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$, $\delta_{x_0}(g) = g(x_0)$. É fácil ver que ela define uma distribuição.

Denominamos tal função generalizada δ_{x_0} de delta de Dirac no ponto x_0 .

Pode-se mostrar que não existe uma função f , tal que $Tf = \delta_{x_0}$. Portanto a aplicação T não é sobrejetiva. Observe ainda que se existisse tal função, ela deveria valer infinito no ponto x_0 e zero em todos os outros pontos. Fisicamente falando, tal "função" δ_{x_0} representa, num certo sentido natural, a distribuição de calor de uma barra de ferro no instante exato em que cai um pingo de solda em um ponto x_0 desta barra. Portanto, poderia ser uma condição inicial para a equação do calor. As distribuições foram criadas, justamente com o intuito de ampliar o conjunto das funções, permitindo considerar matematicamente situações como a descrita acima. δ_{x_0} descreve uma "função" em que não existe dispersão em torno da média x_0 .

Para x_0 fixo a função $p \rightarrow \psi(p) = e^{-\frac{ipx_0}{\hbar}}$ não está em $\mathcal{L}^2(dx)$, mas podemos considerar um funcional linear (distribuição) associado agindo em funções teste φ da forma

$$L_\psi(\varphi)(p) = \int \varphi(p) e^{-\frac{ipx_0}{\hbar}} dp.$$

Podemos definir a derivada de uma distribuição, de maneira coerente com o conceito usual de derivada de função. De fato, note que

$$\mathcal{L}_{f'}(g) = \int_{\mathbb{R}} f'(x)g(x)dx = - \int_{\mathbb{R}} f(x)g'(x)dx = -\mathcal{L}_f(g'),$$

o que motiva a seguinte definição de derivada de uma distribuição L . A derivada de L será denotada pela distribuição L' . Assim, para cada $L \in \mathcal{G}$, temos que dizer qual a ação da sua derivada L' em funções teste g . Desta forma é natural dizer que dada uma g teste, então

$$L'(g) = -L(g').$$

Por exemplo, seja a função $f(x)$ tal que $f(x) = 0$, se $x \leq x_0$, e, tem o valor 1 no outro caso, onde $x_0 \in \mathbb{R}$ está fixado. Esta função não é diferenciável em $x = x_0$. No sentido de distribuição sua derivada é a delta Dirac em x_0 . De fato, seja uma função teste g de classe C^∞ que se anula fora de um intervalo, digamos $[a, b]$. Vamos denotar por L a função f agindo em funções teste g com distribuição.

Assim, suponha primeiro que $x_0 \in [a, b]$. Então

$$L'(g) = - \int_a^b g'(x)f(x)dx = - \int_{x_0}^b g'(x)dx = -[g(b) - g(x_0)] = g(x_0) = \delta_{x_0}(g).$$

No caso em x_0 não está em $[a, b]$ obtemos o mesmo resultado. Desta forma, a afirmação está justificada.

Para concluir, queremos definir a transformada de Fourier de uma distribuição. Este conceito deve generalizar o anteriormente introduzido para as funções usuais. Referimos o leitor para [42] para uma exposição detalhada no assunto.

Definição 13.2. Dada uma distribuição descrita pelo funcional L , para cada $p \in \mathbb{R}^n$ defina

$$\hat{L}(p) = L((2\pi\hbar)^{-1/2}e^{\frac{-ipx}{\hbar}}).$$

Acima L é uma distribuição que age em funções teste $\varphi(x)$ na variável x .

A associação $p \rightarrow L((2\pi\hbar)^{-1/2}e^{\frac{-ipx}{\hbar}})$ (que é uma função ou uma função generalizada) é a transformada de Fourier da distribuição L . Note que \hat{L} age na variável p .

A presente "definição" necessita de alguns reparos. De qualquer modo, a definição é consistente com o descrito anteriormente. De fato, dada $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ com integral finita, a ela associamos a distribuição L_ψ . A transformada de Fourier de ψ é

$$\hat{\psi}(p) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \psi(x) dx = L_\psi((2\pi\hbar)^{-1/2}e^{\frac{-ipx}{\hbar}}) = \hat{L}(p).$$

A propriedade que afirma que para qualquer dado p a integral acima é finita segue do Teorema de Plancherel que foi apresentado na seção 1.4.

Considere agora L a distribuição delta Dirac em x_0 , denotada $\delta_{x_0}(dx)$. Vamos mostrar ao fim desta seção que neste caso $L(\varphi) = \varphi(x_0)$.

Neste caso a sua transformada de Fourier seria a função

$$p \rightarrow \widehat{\delta_{x_0}}(p) = \int ((2\pi\hbar)^{-1/2}e^{\frac{-ipx}{\hbar}}) \delta_{x_0}(dx) = (2\pi\hbar)^{-1/2}e^{\frac{-ipx_0}{\hbar}}.$$

Outro exemplo, associado a $\psi(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{-\frac{ip_0 x}{\hbar}}$ podemos considerar a distribuição

$$L_\psi(\varphi)(s) = \int \varphi(s) e^{-\frac{is p_0}{\hbar}} ds,$$

e sua transformada de Fourier seria dada por

$$p \rightarrow L_\psi((2\pi\hbar)^{-1/2} e^{-\frac{ip s}{\hbar}}) = \int (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{-\frac{ip s}{\hbar}} e^{-\frac{ip_0 s}{\hbar}} ds.$$

Se $p_0 = 0$ temos

$$p \rightarrow L_\psi((2\pi\hbar)^{-1/2} e^{-\frac{ip s}{\hbar}}) = \int (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{-\frac{ip s}{\hbar}} ds.$$

Em qualquer dos dois casos observamos que desta associação não obtemos uma função de fato; podemos no entanto considerar a distribuição associada e perguntar quem é?

Pode se mostrar também que a transformada de Fourier de $x \rightarrow e^{-\frac{ix p_0}{\hbar}}$, onde p_0 esta fixo, no sentido de distribuições, é a delta Dirac em p_0 .

De fato, seja f de classe C^∞ com suporte compacto. Vamos mostrar a afirmação para $p_0 = 0$. Ou seja, a delta Dirac em $x = 0$ é a distribuição (funcional linear) $f \rightarrow \int f(p) (\int e^{-\frac{i}{\hbar} p s} ds) dp$. De fato, esta última distribuição satisfaz

$$f(\cdot) \rightarrow \lim_{A, B \rightarrow \infty} \int f(s) \left(\int_{-A}^B e^{-\frac{i}{\hbar} p s} ds \right) dp.$$

Mas,

$$\begin{aligned} & \int f(s) ds \int_{-A}^B e^{\frac{i}{\hbar} p s} dp = \\ & \int_{-A}^B dp \int f(s) e^{-\frac{i}{\hbar} p s} ds = (2\pi\hbar)^{1/2} \int_{-A}^B \hat{f}(p) dp, \end{aligned}$$

onde \hat{f} é a transformada de Fourier de f .

Assim, se f é uma função teste temos que $f \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(p) dp$ onde \hat{f} é a transformada de Fourier de f . Lembre que a tranformada de

Fourier inversa da transformada de Fourier é a identidade agindo em funções.

Assim temos que

$$f(s) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} \int e^{\frac{i}{\hbar}ps} \hat{f}(p) dp.$$

Logo,

$$\int \hat{f}(p) dp = (2\pi\hbar)^{1/2} f(0).$$

Resulta então

$$\lim_{A,B \rightarrow \infty} \int f(s) ds \int_{-A}^B e^{-\frac{i}{\hbar}ps} dp = f(0).$$

No sentido de distribuição temos que $\int f(s) \delta_0(ds) = f(0)$. Assim, mostramos a propriedade no caso $p_0 = 0$.

Vamos elaborar um pouco a seguir porque $\int f(s) \delta_0(ds) = f(0)$.

Antes, disso observamos apenas que no caso geral de p_0 qualquer é decorrencia da propriedade 3) descrita na seção 1.4

As figura 1.4 e 1.5 ilustram de certa forma o que estamos descrevendo analiticamente acima.

Agora vamos dar um sentido mais formal a afirmação de que vale $\int f(s) \delta_0(ds) = f(0)$.

Vamos descrever a ação da delta Dirac δ_0 via um procedimento limite.

Esse processo de tomar o limite requer um novo olhar sobre a definição de distribuição. Para o bom entendimento necessitamos antes de mais nada de apresentar algumas tecnicidades bem simples. Uma maneira equivalente a feita acima para essa definição é a seguinte: dizemos que a sequência de funções $\{f_n\} \subset C^\infty(\mathbb{R})$ converge fracamente se para toda função $g \in C_0^\infty(\mathbb{R})$, existe o limite

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int f_n(x) g(x) dx.$$

Uma distribuição L é o conceito matemático associado a uma sequência fracamente convergente de $\{f_n\}$, de modo que faz sentido falar em

$$L(g) := \lim_{n \rightarrow \infty} \int f_n(x) g(x) dx$$

Observações:

1. Sequências distintas $\{f_n\}$ podem definir o mesmo funcional linear L . Essas sequências são chamadas sequências equivalentes e definem a mesma distribuição.
2. Uma sequência fracamente convergente pode ou não ser pontualmente convergente, uniformemente convergente, etc.
3. Como na primeira definição de distribuição, fica bem definida a derivada, e isto está coerente com o fato de generalizarmos o conceito de função desta forma. Então, seja $L = L_\phi$ para alguma função usual ϕ . A definição de derivada de uma distribuição é consistente. De fato, comprovamos isto via as expressões

$$\int \phi'(x)g(x)dx := \lim_{n \rightarrow \infty} \int f'_n(x)g(x)dx =$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} - \int f_n(x)g'(x)dx = - \int \phi(x)g'(x)dx.$$

Pode-se mostrar que essa segunda definição de distribuição via este procedimento é equivalente a primeira. Mas ela ainda não está suficientemente boa para definir a transformada de Fourier de uma distribuição. Para que possamos fazer isso, será necessário restringir o conjunto no qual as funções f_n podem variar.

É possível dar um sentido geral ao conceito de convergência no espaço das distribuições e isto conduz ao conceito de espaço de Sobolev (ver seção 3.1 em [14]).

Dizemos que uma função é de Schwartz, se

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} x^n \frac{d^m}{dx^m} f(x) = 0 \quad \forall n, m \in \mathbb{N}.$$

Uma distribuição cuja transformada de Fourier está bem definida é uma aplicação obtida como limite fraco de uma sequência de funções de Schwartz. No presente texto não vamos apresentar a formulação completa deste tópico que é bem complexo.

Finalmente, após estes preliminares, podemos apresentar uma boa definição de transformada de Fourier para distribuições. Dada uma

distribuição ϕ associada a seqüência de funções de Schwartz f_n , definimos a transformada de Fourier de ϕ , denotada por $\hat{\phi}$, como a distribuição limite associada a seqüência de funções de Schwartz \hat{f}_n . Observa-se que a transformada de Fourier de uma função de Schwartz é de Schwartz e o mesmo ocorre com a inversa da transformada. Além disso, se uma seqüência de funções de Schwartz converge fracamente, a seqüência de suas transformadas também converge fracamente.

A distribuição δ_{x_0} vai ser obtida via um procedimento limite envolvendo funções f_n .

Como ilustração do que desejamos estabelecer vamos considerar o que seria a transformada de Fourier da distribuição δ_{x_0} . Tomando

$$f_n(x) = \frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2(x-x_0)^2},$$

devemos mostrar que f_n converge fracamente a δ_{x_0} no sentido acima, ou seja, que para qualquer g com suporte compacto

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int \frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2(x-x_0)^2} g(x) dx = g(x_0).$$

Como $\int f_n(x) dx = 1$, temos que isto equivale a

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int \frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2(x-x_0)^2} [g(x) - g(x_0)] dx = 0.$$

Assim, podemos supor que $g(x_0) = 0$. Por mudança de variável podemos supor que $x_0 = 0$.

Resta assim provar que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int \frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2 x^2} g(x) dx = 0$$

para qualquer g com suporte compacto satisfazendo $g(x_0) = 0$.

Como assumimos que $g \in C_0^\infty(\mathbb{R})$, temos que g' é contínua e limitada. Logo, existe $C > 0$ tal que para qualquer x vale $|g(x)| \leq C|x|$. Portanto

$$\left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2 x^2} g(x) dx \right| \leq \frac{Cn}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-n^2 x^2} |x| dx =$$

$$2 \frac{Cn}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-n^2 x^2} |x| dx = \frac{C}{n\sqrt{\pi}}.$$

Assim,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2 x^2} g(x) dx \right| = 0$$

o que prova o resultado desejado.

Sendo assim, no sentido de distribuições é lícito dizer que a transformada de Fourier da delta Dirac em x_0 é a função $p \rightarrow \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{-\frac{i p x_0}{\hbar}}$. Esta função não está em $\mathcal{L}^2(dp)$.

Bibliografia

- [1] N. Akhiezer and I. Glasman, Theory of Linear Operators in Hilber Space, Dover.
- [2] M. Aguiar, Tópicos de Mecânica Clássica, Editora Livraria da Física, 2011.
- [3] M. Aguiar, O Limite semiclássico da Mecânica Quântica, Notas de aula,
<http://www.ifi.unicamp.br/~aguiar/Notas/notas.html>
- [4] S. Albeverio, Mathematical Theory of Feynman Path Integrals : An Introduction, Springer Verlag.
- [5] A. O. de Almeida, Sistemas Hamiltonianos: caos e quantização, Editora Unicamp, 1993.
- [6] T. Aoki, S. Kanemitsu, M. Nakahara and Y. Ohno, Zeta Functions, Topology and Quantum Physics, Springer (2005)
- [7] V. Arnold, Mathematical Methods of Classical Mechanics, Springer Verlag, 2010.
- [8] B. Amaral, A. Baraviera e M. Terra Cunha, Mecânica Quântica para matemáticos em formação, 28 Colóquio Brasileiro de Matemática
- [9] N. Anantharaman, Entropie et localisation des fonctions propres, Document de Synthese, Ecole Normale Superieure de Lyon (2006)

- [10] N. Anantharaman and A. Backer, Quantum ergodicity and beyond (with a gallery of pictures), IAMP News Bulletin, April 2013, 10-28
- [11] S. Attal, Quantum Mechanics, Lecture 5
[http://math.univ-lyon1.fr/~attal/Quantum Mechanics.pdf](http://math.univ-lyon1.fr/~attal/Quantum%20Mechanics.pdf)
- [12] G. Auletta, M. Fortunato, and G. Parisi, Quantum Mechanics Cambridge University Press, 2009.
- [13] B. Baaquie, Path Integrals and Hamiltonians, Cambridge Press, 2014
- [14] A. V. Balakrishnan, Applied Functional Analysis. Springer-Verlag, 1976.
- [15] L. Ballentine, Quantum Mechanics, World Scientific Press, 1998.
- [16] A. Baraviera, Introdução à Mecânica Quântica, Primeiro Colóq Mat. Reg. Sul (2010)
- [17] A. Baraviera, C. F. Lardizabal, A. O. Lopes and M. Terra Cunha, A dynamical point of view of quantum information: entropy and pressure. Dynamics, games and science. II, 81-122, Springer Proc. Math., 2, Springer, Heidelberg, 2011.
- [18] A. Baraviera, C. F. Lardizabal, A. O. Lopes and M. Terra Cunha, A dynamical point of view of quantum information: discrete Wigner measures. Dynamics, games and science. II, 161-185, Springer Proc. Math., 2, Springer, Heidelberg, 2011.
- [19] A. Baraviera, C. F. Lardizabal, A. O. Lopes and M. Terra Cunha, A Thermodynamic Formalism for density matrices in Quantum Information, Applied Mathematics Research Express, Vol. 2010, No. 1, pp. 63-118 (2010)
- [20] A. T. Baraviera, L. M. Cioletti, A. Lopes, J. Mohr and R. R. Souza, On the general one dimensional XY Model: positive and zero temperature, selection and non-selection, Reviews in Math. Physics, VOL 23, N. 10, pp 1063-1113 (2011)
- [21] R. Bartle, The Elements of Real Analysis, Wiley, 1964.

- [22] G. Baumann, *Mathematica for Theoretical Physics: Electrodynamics, Quantum Mechanics, General Relativity, and Fractals*, Springer
- [23] C. M. Bender and S. A. Orszag, *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers I*, Springer Verlag (1999)
- [24] A. V. Belinsky and A. K. Zhukovsky, *Nonlocality in Quantum Theory*, Arxiv (2015)
- [25] F. Benatti, *Dynamics, Information and Complexity in Quantum Systems*. Springer, 2009.
- [26] C. M. Bender, D. C. Brody and M. P. Muller, *Hamiltonian for the zeros of the Riemann zeta function*, Arxiv (2016)
- [27] G. Benenti, G. Casati and G. Strini, *Principles of Quantum Computation and Information*, Vol I and II, World scientific, 2007
- [28] E. DiBenedetto and A. Friedman, Hölder estimates for nonlinear degenerate parabolic systems, *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, 357, 1-22 (1984)
- [29] F. A. Berezin and M.A. Shubin, *The Schrodinger equation*, Kluwer Press
- [30] M. V. Berry and J. P. Keating, $H = xp$ and the Riemann zeros. In *Supersymmetry and Trace Formulae: Chaos and Disorder*, edited by I.V. Lerner et al. Kluwer Academic, New York, (1999).
- [31] R. Bissacot and L. Cioletti, *Introdução às medidas de Gibbs*, Notes USP (2013)
- [32] A. Biryuk and D. Gomes, An introduction to Aubry-Mather theory, *Sao Paulo Journal of Mathematical Sciences* 4 (1),17-63 (2010)
- [33] J. Blank, P. Exner and M. Havlicek, *Hilbert Space Operators in Quantum Physics*, Springer Verlag.
- [34] P. Blanchard and E. Bruning, *Mathematical Methods in Physics: Distributions, Hilbert Space Operators, Variational Methods, and Applications in Quantum Physics*, Springer (2015)

- [35] E. Bogomolny and M. Carioli, Quantum maps of geodesic flows on surfaces of constant negative curvature, IV International Conference on PATH INTEGRALS FROM meV TO MeV, Tutzing May, (1992) 18-21.
- [36] A. Bovier, Statistical Mechanics of Disordered Systems. A Mathematical Perspective. Cambridge University Press (2006).
- [37] A. Bohm, A. Mostafazadeh, H. Koismumi, K. Niu and J. Zwanziger, The Geometric Phase in Quantum Systems, Springer verlag (2003)
- [38] O. Bratteli and D. Robinson, Operator algebras and quantum statistical mechanics, vols. 1 e 2. Second edition. Springer-Verlag, 1997.
- [39] E. Butkov, Mathematical Physics, Academic Press, Addison-Wesley, 1968.
- [40] I. Bengtsson and K. Życzkowski, Geometry of Quantum states, Cambridge Press (2006)
- [41] M. Brack and R. Bhaduri, Semiclassical Physics, Addison Wesley.
- [42] H. Brezis, Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations, Springer Verlag, (2011)
- [43] C. Beny and F. Richter, Algebraic approach to quantum theory: a finite-dimensional guide, Arxiv (2015)
- [44] M. do Carmo, Geometria Diferencial de Curvas e Superfícies, Textos Universitários, SBM, (2006)
- [45] M. do Carmo, Geometria Riemanniana, Projeto Euclides, IMPA
- [46] S. L. Carvalho, L. F. Guidi and C. F. Lardizabal, Site recurrence of open and unitary quantum walks on the line, Quantum Information Processing 16:17 (2017)
- [47] A. A. de Castro Junior, Funções de Operador e o estudo do Espectro, XXIX Colóquio Brasileiro de Matemática, IMPA, Rio de Janeiro (2013)

- [48] A. M. Cetto, L. de la Pena and A. Valdes-Hernandez, Specificity of the Schrödinger equation, *Quantum Studies: Mathematics and Foundations*
- [49] Mou-Hsiung Chang, *Quantum Stochastics*, Cambridge Press (2015)
- [50] Yi-Zen Chu, *Analytical Methods in Physics*, Arxiv (2017)
- [51] L. Cycon, R. G. Froese, W. Kirsch and B. Simon, *Schrodinger Operators*, Springer Verlag (1987)
- [52] M. Combesure and D. Robert, *Coherent states and applications in mathematical physics*, Springer (2012)
- [53] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloe, *Waves and particles. Introduction to the fundamental ideas of Quantum Mechanics*, 1992
- [54] A. Connes, Trace formula in noncommutative geometry and the zeros of the Riemann zeta function. *Selecta Mathematica*, New Series 5, 29-106 (1999).
- [55] A. Connes, Sur la theorie non commutative de l'integration, *Lect. Notes in Math*, vol 275, Springer (1979)
- [56] G. Contreras and R. Iturriaga, Global minimizers of autonomous La-grangians, 22^o Colóquio Brasileiro de Matemática, IMPA, 1999.
- [57] J. Conway, *Functional Analysis*, Springer
- [58] J. Conway, *Functions of one Complex Variable*, Springer Verlag, (1978).
- [59] D.S.F. Crothers, *Semiclassical Dynamics and Relaxation*, Springer Verlag
- [60] T. L Curtright, D. Fairlie and C. Zachos, *A Concise Treatise on Quantum Mechanics in Phase Space*, World Scientific (2014)
- [61] D. Damanik, *Schrodinger Operators with dynamically defined potentials*, survey (2014)

- [62] I. Daubechies, Continuity statements and counterintuitive examples in connection with Weyl quantization, *J. Math. Phys.* 24(6), 1453–1461 (1983)
- [63] F. David, *The Formalisms of Quantum Mechanics*, Springer Verlag (2015)
- [64] E. Davies, *Spectral Theory and Differential operators*, Cambridge Press (1995)
- [65] S. De Bièvre, Quantum chaos: a brief visit, *Contemp. Math.*, 289, pp 161-218, (2001)
- [66] M. de Gosson, *Symplectic Geometry and Quantum Mechanics*. Ed. Birkhauser, 2006
- [67] M. de Gosson, *Quantum Harmonic Analysis of the Density Matrix: Basics*, Arxiv (2017)
- [68] M. de Gosson, *A Geometric Picture of the Wave Function: Fermi's Trick*, Arxiv (2012)
- [69] Y. C. de Verdiere, *Methods semi-classiques et Theorie Spectrale*, Inst. Fourier, <https://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~ycolver/All-Articles/93b.pdf>
- [70] L. de la Pena, A. M. Cetto, A. Valdes-Hernandez, *The Emerging Quantum. The Physics Behind Quantum Mechanics*, Springer (2015)
- [71] E. de Farias and W. de Melo, *Mathematical aspects of Quantum Field Theory*, Pub. MAAt. - IMPA
- [72] G. DellAntonio, *Lectures on the Mathematics of Quantum Mechanics I*, Atlantis Press (2015)
- [73] G. DellAntonio, *Lectures on the Mathematics of Quantum Mechanics II*, Atlantis Press (2016)
- [74] J. Dimock, *Quantum Mechanics and Quantum Field Theory*, Cambridge Theory. Commun. in Math. Phys., 244, 311-334, 2004

- [75] C. Doering and A. O. Lopes, Equações Diferenciais Ordinárias, Col Mat Universitária, IMPA
- [76] W. Dittrich and M. Reuter, Classical and Quantum Dynamics, Springer Verlag
- [77] I. Dolgachev, Introduction to quantum physics for mathematicians, Lecture Notes Ann Harbor, 1996
- [78] Bruce K. Driver, Lecture Notes, Univ. of San Diego, 2013
- [79] N. Dunford and Schwartz, Linear Operators, Part 1, Interscience, New York (1958).
- [80] N. Dunford and Schwartz, Linear Operators, Part 2, Interscience, New York (1958).
- [81] D. Durr and S. Teufel, Bohmian Mechanics, Springer (2009)
- [82] Yu. Egorov and M. Shubin, Foundations of the Classical Theory of Partial Differential Equations, Spinger Verlag (1998)
- [83] R. S. Ellis, Entropy, Large Deviations, and Statistical Mechanics. Springer-Verlag, 1985.
- [84] L. C. Evans, Towards a Quantum Analog of Weak KAM Theory. Commun. in Math. Phys., 244, 311-334, 2004
- [85] L. C. Evans, Partial Differential Equations. AMS, 2000.
- [86] L. C. Evans and M. Zworski, Lectures on semiclassical analysis, Univ. Cal - Berkeley (2015)
- [87] L. Evans and D. Gomes, Effective Hamiltonians and averaging for Hamiltonian Dynamics I, Arch. Rat. Mech Anal 157, 1-33 (2001)
- [88] D. Evans and Y. Kawahigashi, Quantum symetries and operator algebras, Claredon Press, (1998)
- [89] R. Exel and A. Lopes, C^* -algebras, approximately proper equivalence relations and thermodynamic formalism, Ergod. Theo. and Dynam. Sys., 24, 1051-1082 (2004)

- [90] R. Exel and A. Lopes, C^* - Algebras and Thermodynamic Formalism, Sao Paulo Journal of Mathematical Sciences - (USP-Sao Paulo) Vol. 2 (1), 285-307 (2008)
- [91] Y. Miyanishi, Notes on Feynman path integral-like methods of quantization on Riemannian manifolds,, Arxiv (2015)
- [92] L. Faddeev, Lectures on Quantum Mechanics for Students of Mathematics, AMS.
- [93] A. Fathi, Weak KAM Theorem and Lagrangian Dynamics, (2004), To appear.
- [94] F. Faure, Semiclassical origin of the spectral gap for transfer operators of a partially expanding map, Nonlinearity 24, 1473-1498 (2011)
- [95] J. Feagin, Quantum Methods with Mathematica, Springer Verlag (1994)
- [96] P. Fernandez, Teoria da Medida, Proj. Euclides, IMPA
- [97] V. Fedoryuk and P. Maslov, Semi-Classical approximation in Quantum Mechanics, Redidel (1981)
- [98] A. Figalli, C. Klein, P. Markowich and C. Sparber, WKB analysis of Bohmian dynamics. Comm. Pure Appl. Math. 67, no. 4, 581–620 (2014).
- [99] G. Folland, Quantum Field Theory, AMS
- [100] G. B. Folland, Harmonic analysis on phase space, Princeton Press, (1989)
- [101] A. C. C. van Enter, R. Fernandez R. and A. Sokal, Regularity properties and pathologies of position-space renormalization-group transformations: Scope and limitations of Gibbsian theory, Journ. of Stat. Phys., Vol 72, N 5/6, 1993 pp 879-1187.
- [102] Y. Fukui and T. Horiguchi, Ground state properties of one-dimensional quantum chiral XY-model. Interdiscip. Inform. Sci., n.1, pp 57-66 (2002)

- [103] B. Fritzsche, B. Kirstein, I.Ya. Roitberg and A.L. Sakhnovich, Continuous and discrete dynamical Schrodinger systems: explicit solutions, Arxiv (2017)
- [104] G. Gallavotti, Statistical Mechanics: A Short Treatise, Springer Verlag
- [105] A. Friedman, The asymptotic behaviour of the first eigenvalue of second order elliptic operators with a small parameter in the highest derivative, Indiana Univ. MATH J. 22 (10) 1005-1015 (1973)
- [106] A. Friedman, Stochastic differential equations and applications, Vol I, Academic Press
- [107] A. Friedman, Stochastic differential equations and applications, Vol II, Academic Press
- [108] M. Friedlin and A. Wentzell, Random perturbation of Dynamical Systems, Springer Verlag (1984)
- [109] A. Galindo and P. Pascual, Quantum Mechanics, Springer Verlag, (1990)
- [110] A. Gerolin, Un probleme Spectral inverse Semi-Classique, Document de Synthese, Inst. Fourier (2009)
- [111] H. Girotti, An Introduction to the Functional Formulation of Quantum Mechanics, World Scientific Publishing (2013)
- [112] Hans-Otto Georgii, Gibbs Measures and Phase Transitions, ed. De Gruyter
- [113] D. Gillespie, A Quantum Mechanics Primer, John Wiley (1970)
- [114] J. Gleason, The C^* -algebraic formalism of Quantum Mechanics,
[http://www.math.uchicago.edu/~may/
VIGRE/VIGRE2009/REUPapers/Gleason.pdf](http://www.math.uchicago.edu/~may/VIGRE/VIGRE2009/REUPapers/Gleason.pdf)
- [115] J. Glimm and A. Jaffe, Quantum Physics: A Functional Integral Point of View, Springer Verlag (1981)

- [116] D. A. Gomes , A. O. Lopes and J. Mohr, Wigner measures and the semi-classical limit to the Aubry-Mather measure, Applied Mathematics Research Express, Volume 2012, Issue 2, 152-183 (2012)
- [117] K. Gottfried and T-M Yan, Quantum Mechanics: Fundamentals, Springer Verlag (2003)
- [118] F. Guerra and L. Morato. Quantization of dynamical systems and stochastic control theory. Phys. Rev. D 27, 1774-1786, 1983
- [119] W. Greiner, Quantum Mechanics, an introduction, Springer Verlag
- [120] D. Griffiths, An introduction to Quantum Mechanics, Prentice Hall.
- [121] A. Grunbaum, L. Vinet and A. Zhedanov, Birth and death processes and quantum spin chains. J. Math. Phys 54 (2013), no. 6, 062101, 12 pp.
- [122] V. Guillemin and S. Sternberg, Semi-Classical Analysis, International Press of Boston (2013)
- [123] S. Gustafson and I. Sigal, Mathematical concepts of Quantum Mechanics, Springer Verlag, (2000).
- [124] Martin C. Gutzwiller, Chaos in Classical and Quantum Mechanics, Springer (1990)
- [125] M. J. W. Hall and M. Reginatto, Schrödinger equation from an exact uncertainty principle, J. Phys. A: Math. Gen. 35, 3289-3303, 2002
- [126] B. C. Hall, Quantum theory for mathematicians, Springer Verlag (2013)
- [127] K. Hannabuss, An Introduction to Quantum Theory, Oxford Press (1997)
- [128] R. J. Harvey, Navier-Stokes analog of Quantum Mechanics.

- [129] C. Haupt, A Quantum Mechanical Bound for Space-Energy Cost with Respect to the Von Neumann Entropy, Arxiv (2016)
- [130] J. Heading, An Introduction to Phase-Integral Methods, Dover Pub. (2013) *Physical Review*, 152(4):1115, 1966.
- [131] S. Helgason, Topics in Harmonic Analysis on Homogeneous Spaces, Birkhauser, Kluwer, 1981.
- [132] G. Helmsberg, Introduction to Spectral Theory in Hilber Space, Dover, (1997)
- [133] B. Helffer, Semi-classical analysis for the Schrodinger operator and applications, Springer Lect. Notes in Math., 1336 (1988).
- [134] B. Helfer, Spectral theory and applications. An elementary introductory course. Bucarest Version (2010)
- [135] B. Helffer and J. Sjostrand, Multiple Wells in the semi-classical limit I, *Comm. in P.D.E* 9, 337-408 (1984)
- [136] A. Heslot, Quantum Mechanics as a classical theory. *Phys. Rev. D* (3) 31 (1985), no. 6, 1341–1348.
- [137] E. Hewitt and K. Stromberg, Real and Abstract Analysis, Springer Verlag, (1965)
- [138] D. Holcman and I. Kupka, Singular perturbation for the first eigenvalue and blow up analysis, *Forum Math.* 18, 445-518 (2006)
- [139] D. Holcman and I. Kupka, Semi-classical limits of the first eigenfunction and concentration on the recurrent sets of a dynamical system, *Forum Math.* 23, 1-74 (2011)
- [140] D. Holcman, Nonlinear pde with vector fields, *J. Anal. Math* 81, 111-137 (2000)
- [141] C. S. Honig, Análise Funcional e o probelma de Sturm Liouville, Ed. Edgard Blucher (1978)
- [142] J. Hounie, Introdução aos operadores Pseudo-diferenciais, 16. *Coloq Bras. Matematica*, IMPA, Rio de Janeiro

- [143] M. Horodecki, P. Horodecki and R. Horodecki, Separability of mixed states: necessary and sufficient conditions. *Phys. Lett. A* 223, no. 1-2, 1-8 (1996)
- [144] J. Helm, Classical vs. Quantum Decoherence, Dissertation, Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften der Technischen Universität Dresden (2011)
- [145] P. Hislop and I. Sigal, Introduction to Spectral Theory, Springer
- [146] R. Iorio, Tópicos na teoria da equação de Schrodinger, 16 Colóquio Brasileiro de Matematica, IMPA,
- [147] C. Isham, Lectures on Quantum Theory. Imperial College Press, 1995.
- [148] O. D. Johns, Analytical Mechanics for Relativity and Quantum Mechanics, Oxford Press
- [149] G. Johnson and M. Lapidus, The Feynman Integral and Feynman's Operational Calculus, Oxford Press, (2002)
- [150] T. Kato, Perturbation Theory for Linear Operators, Springer
- [151] M. Kac, Integration in Function Spaces and some applications, ENS Pisa, 1980
- [152] I. Karatzas and S. Shreve, Brownian Motion and Stochastic Calculus, Springer Verlag, 1991
- [153] G. Kuperberg, A concise introduction to quantum probability, quantum mechanics, and quantum computation, preprint U. C. Davis (2007) <https://www.math.ucdavis.edu/greg/intro.pdf>
- [154] Y. Kifer, Principal eigenvalues, topological pressure, and stochastic stability of equilibrium states. *Israel J. Math.* 70 (1990), 1-47
- [155] Y. Kifer, On the principal eigenvalue in a singular perturbation problem with hyperbolic limit points and circles. *J. Differential Equations* 37 (1980), 108-139

- [156] U. Klein, What is the limit $\hbar \rightarrow \infty$ of quantum theory, Arxiv 2012
- [157] E. Kreyzig, Introduction to Functional Analysis with Applications, Wiley
- [158] A. Knauf and Y. Sinai, Classical nonintegrability, quantum chaos, Birkhauser (1997)
- [159] S. Karlin and H. Taylor, A First course in Stochastic Processes, Academic Press.
- [160] S. Karlin and H. Taylor, A Second course in Stochastic Processes, Academic Press.
- [161] V. Kondratev and M. Shubin, Discreteness of spectrum for the Schrödinger operators on manifolds of bounded geometry. The Mazya anniversary collection, Vol. 2, 185-226, Oper. Theory Adv. Appl. (1999)
- [162] V. N. Kolokoltsov, Semiclassical analysis for diffusions and stochastic processes, volume 1724, Lecture Notes in Mathematics. Springer, 2000.
- [163] C. Kubrusly, Spectral Theory of Operators on Hilbert Spaces, Birkhauser (2012)
- [164] G. Landi, An Introduction to Noncommutative Spaces and Their Geometries, Springer Verlag (2014)
- [165] N. Landsman, Mathematical Topics Between Classical and Quantum Mechanics, Springer Verlag (1998)
- [166] N. Landsman, Lecture Notes on C^* -Algebras and Quantum Mechanics, Univ. of Amsterdam (1998)
- [167] O. Lanford and D. Ruelle, Observables at infinity and states with short range correlation in statistical mechanics. Comm. Math. Phys. Vol. 13, 194-215, (1969).
- [168] S. Lang, Differential manifolds, Addison-Wesley Publishing Co (1972)

- [169] S. Lang, Introduction to Differentiable Manifolds, Springer Verlag (2002)
- [170] C. F. Lardizabal, Cadeias de Markov Clássicas e Quânticas, Dissertação de Mestrado, UFRGS (2006)
- [171] C. F. Lardizabal, Open Quantum Random Walks and the Mean Hitting Time Formula. Quantum Information and Computation, Vol. 17, No. 1-2 (2017) 79-105.
- [172] C. F. Lardizabal and R. Souza, Open Quantum Random Walks: ergodicity, hitting times, gambler's ruin and potential theory, Journal of Statistical Physics, 164: 1122-1156 (2016). doi
- [173] C. F. Lardizabal and R. Souza, On a class of quantum channels, open random walks and recurrence, Journal of Statistical Physics, 159: 772-796 (2015).
- [174] C. F. Lardizabal A quantization procedure based on completely positive maps and Markov operators. Quantum Information Processing, 12: 1033-1051 (2013).
- [175] B. M. Levitan and I. Sargsjan, Sturm-Liouville and Dirac Operators, Kluwer (1991)
- [176] H. Lieb and M. Loss, Analysis, AMS (2001)
- [177] J. Leray, Analyse Lagrangienne en Mecanique Semi-classique, Cours au Coll. de France (1976-1977)
- [178] E. L. Lima, Álgebra Linear, Col. Mat. Univ., IMPA, (2006)
- [179] E. L. Lima, Espaços Métricos. Projeto Euclides, (1996).
- [180] E. L. Lima, Curso de Análise, Vol I, Projeto Euclides, (1981).
- [181] E. L. Lima, Curso de Análise, Vol II, Projeto Euclides, (1981).
- [182] P. Lions and T. Paul, Sur les mesures de Wigner, Rev. Mat. Iberoamerican 9 (3), 553-618 (1993)
- [183] P. Lions, P. Papanicolau and G. Varadhan, Homogenization of Hamilton-Jacobi equations, unpublished, circa (1988)

- [184] A. O. Lopes, *Introdução à Mecânica Clássica*, Edusp (2006)
- [185] A. O. Lopes, *Tópicos de Mecânica Clássica*, IMPA (2012)
- [186] A. O. Lopes e S. Lopes, *Introdução aos Processos Estocásticos para estudantes de Matemática* (2012)
- [187] A. Lopes and P. Thieullen, Eigenfunctions of the Laplacian and associated Ruelle operator, *Nonlinearity*, Volume 21, Number 10, 2239-2254 (2008)
- [188] A. Lopes, J. Mengue, J. Mohr and R. R. Souza, Entropy and Variational Principle for one-dimensional Lattice Systems with a general a-priori measure: positive and zero temperature, *Erg. Theory and Dyn Syst.* 35 (6), 1925–1961 (2015)
- [189] A. O. Lopes, *Introdução à Matemática da Mecânica Quântica*,
- [190] A. O. Lopes and P. Thieullen, Transport and large deviations for Schrodinger operators and Mather measures, *Modeling, Dynamics, Optimization and Bioeconomics II*, Editors: Alberto Pinto and David Zilberman, *Proceedings in Mathematics and Statistics*, Springer Verlag
- [191] A. Lopes, Jairo K. Mengue and Joana Mohr, Large Deviations for Quantum Spin probabilities at temperature zero (2015)
- [192] A. Lopes and M. Sebastiani, Generic properties for random repeated quantum iterations, *Quantum Studies: Mathematics and Foundations*, Vol 2, pp 389-402 (2015)
- [193] A. Lopes and M. Sebastiani, A detailed proof of the von Neumann's Quantum Ergodic Theorem, *Quantum Studies: Mathematics and Foundations* (2017)
- [194] A. Lopes and J. Mohr, Semiclassical limits, Lagrangian states and coboundary equations, *Stochastics and Dynamics*, Vol 17. N 2, 1750014 (19 pages) (2017)
- [195] A. Lopes and G. Mantovani, The KMS Condition for the homoclinic equivalence relation and Gibbs probabilities, preprint (2017)

- [196] Y-G Lu, Quantum Markov Chains and classical random sequences. Nagoya Math. Journal. Vol. 139 (1995), pp. 173-183.
- [197] A. Lozinski, K. Zyczowski and W. Slomczynski, Quantum iterated function systems, Physical Review E, Volume 68, 046110, (2003)
- [198] I. Madsen and J. Tornehave, From calculus to cohomology: De Rham cohomology and characteristic classes. Cambridge University Press, 1997.
- [199] W. A. Majewski, Quantum correlations; quantum probability approach, prepr int Arxiv (2014)
- [200] A. Mann, P. A. Mello and M. Revzen, A family of Weyl–Wigner transforms for discrete variables defined in a finite-dimensional Hilbert space, Quantum Studies (2017)
- [201] V. Marchenko, Sturm-Liouville Operators and applications, Birkhauser (1986)
- [202] A. Martinez, An introduction to semiclassical and Microlocal Analysis, Springer (2002)
- [203] S. Mazzucchi, Mathematical Feynman path integrals and their applications, World Scientific.
- [204] E. Merzbacher, Quantum Mechanics, John Wiley
- [205] V. Maslov and M. Fedoryuk, Semiclassical approximation in Quantum Mechanics, Reidel, Boston.
- [206] P. D. Miller, Applied Asymptotics analysis, AMS, 2006
- [207] M. M. Miranda, Análise Espectral em Espaços de Hilbert, Textos de Métodos Matemáticos, UFRJ (1990)
- [208] N. Moiseyev, Non-Hermitian Quantum Mechanics, Cambridge University Press (2011)
- [209] H. Muller-Kirsten, Introduction to Quantum Mechanics, World Scientific.

- [210] J. D. Murray, *Asymptotics analysis*, Springer Verlag, 1984
- [211] G. Murphy, *C^* algebras and operator theory*, Academic Press
- [212] M. Nagasawa, *Schrödinger Equations and Diffusion Theory*, Birkhauser
- [213] P. Naaijken, *Quantum Spin Systems on Infinite Lattices*, Arxiv (2013)
- [214] I. Nechita and C. Pellegrini, Random repeated quantum interactions and random invariant states, *Prob. Theory Relat. Fields*, 152, pp 299-320 (2012)
- [215] R. Newton, *Quantum Physics*, Springer Verlag
- [216] E. Nelson, *Quantum fluctuations*, Princeton Press, 1985.
- [217] M. Nielsen and I. Chuang, *Quantum computation and quantum information*. Cambridge University Press, 2000.
- [218] S. Neshveyev and E. Størmer, *Dynamical Entropy in Operator Algebras*, Springer Verlag, (2006)
- [219] Cesar R. de Oliveira, *Introdução à Análise Funcional*, Proj. Euclides, IMPA
- [220] Cesar R. de Oliveira, *Intermediate Spectral Theory and Quantum Dynamics*, Birkhauser.
- [221] I. S. Oliveira e R. S. Sarthour, *Computação Quântica e Informação Quântica*, V Escola do CBPF - Rio de Janeiro. (2004)
- [222] M. Ohya and D. Petz, *Quantum entropy and its use*, Texts and monographs in physics. Springer-Verlag, Berlin. 1993.
- [223] F. Olver, *Asymptotics and Special Functions*, Academic Press (1974)
- [224] K. Osterwalder and R. Schrader, Feynman-Kac formula for Euclidean Fermi and Bose Fields, *Phys. Rev. Lett.* 29 (1972) 1423

- [225] K. Osterwalder and R. Schrader, Euclidean Fermi Fields and a Feynman-Kac formula for boson-fermion models, *Helv. Phys. Acta* 46, 277, (1973).
- [226] J. B. Parkinson and D. Farnell, *An Introduction to Quantum Spin Systems*, Springer Verlag, 2010.
- [227] F. Paugam, *Les mathématiques de la physique moderne* (2009) notas Institut de Mathématiques de Jussieu.
- [228] F. Paugam, *Towards the mathematics of quantum field theory*, Springer, (2014)
- [229] E. Prugovecki, *Quantum Mechanics in Hilbert space*. Academic Press, (1971)
- [230] A. Perelomov, *Generalized coherent states and their applications*, Springer Verlag (1986)
- [231] A. Peres, Separability criterion for density matrices. *Phys. Rev. Lett.* 77 (1996), no. 8, 1433-1415.
- [232] D. Petz, *Quantum Information Theory and Quantum Statistics*, Springer Verlag (2008)
- [233] G. Pedersen, *C^* -algebras and their automorphism groups*, Academic Press, 1979
- [234] M. Pollicott and Yuri, *Dynamical Systems and Ergodic Theory*, Cambridge Press
- [235] W. Parry and M. Pollicott, Zeta functions and the periodic orbit structure of hyperbolic dynamics, *Astérisque* N. **187-188** (1990).
- [236] C-A. Pillet, *Quantum Dynamical Systems*, Open Quantum Systems, I. Lecture Notes in Math, 1880, pp 107-182, Springer Verlag (2006)
- [237] J. Renault, *A Groupoid approach to C^* -algebras*, Lecture Notes in Mathematics 793, Springer-Verlag, (1980)

- [238] J. Renault, C^* -Algebras and Dynamical Systems, XXVII Coloquio Bras. de Matematica - IMPA (2009)
- [239] G. Riviere, Long-time dynamics of the perturbed Schrödinger equation on negatively curved surfaces, Arxiv 2014
- [240] D. Robert, Autour de l'approximation semi-classique, Birkhauser (1987)
- [241] W. Reed and B. Simon, Methods os Modern Mathematical Physics, I, Functional Analysis, Springer.
- [242] W. Reed and B. Simon, Methods os Modern Mathematical Physics, II, Fourier Analysis and Self-adjointness, Springer.
- [243] W. de Roeck, C. Maes, K. Netockny and M. Schitz, Locality and nonlocality of classical restrictions of quantum spin systems with applications to quantum large deviations and entanglement, Arxiv 2013
- [244] W. Rudin, Real and Complex Analysis, McGraw Hill, 1970
- [245] W. Rudin, Functional Analysis, Press.
- [246] P. Sarnak, Arithmetic quantum chaos. In The Schur lectures (1992) (Tel Aviv), volume 8 of Israel Math. Conf. Proc., pages 183–236. Bar-Ilan Univ., Ramat Gan, (1995)
- [247] P. Sarnak, Recent progress on the quantum unique ergodicity conjecture, Bull. of the AMS, Volume 48, Number 2, April 2011, Pages 211–228
- [248] M. Schechter, Operator Methods in Quantum Mechanics, Dover.
- [249] L. Schulman, Tecniques and Applications of Path Integration, Dover
- [250] R. Shankar, Principles of Quantum Mechanics, Kluwer
- [251] B. Simon, Quantum Mechanics for Hamiltonians defined as quadratic forms, Princeton Series in Physics (1971)

- [252] B. Simon, *Functional Integration and Quantum Physics*, Academic Press.
- [253] B. Simon, Semiclassical Analysis of low lying eigenvalues. I Non-degenerate Minima: Asymptotic expansion, *Ann. Inst. Henry Poincare* Vol XXXVIII, (3) , 295-307 (1983)
- [254] B. Simon, Semiclassical Analysis of low lying eigenvalues. II tunneling, *Ann. of Math* 120, 89-118 (1984)
- [255] W. Simon, Mathematics of the Spin, <https://www.urmc.rochester.edu/labs/Simon-Lab/publications/pdfs/Spin.pdf>
- [256] Ya. Sinai, *Probability Theory*. Springer-Verlag, 1992.
- [257] F. Spitzer, A variational characterization of finite Markov chains. *Annals of Math. Statistics*, Vol 43, No. 1, 1972, p. 303-307.
- [258] A. Sinha, A. Vijay and U. Sinha, On the superposition principle in interference experiments, *Arxiv* (2015)
- [259] W. Slomczynski and K. Zyczowski, Quantum chaos: an entropy approach, *J. math. Phys.* 35 (11), (1994) pp 5674-5700
- [260] W. Slomczynski, *Dynamical Entropy, Markov Operators and Iterated Function Systems*. Jagiellonian University Press, (2003).
- [261] C. Sogge, *Hangzhou Lectures on Eigenfunctions of the Laplacian*, Princeton Press (2014)
- [262] M. Swanson, *Path Integrals and Quantum Processes*, Dover (2014)
- [263] C. Sparber, Semiclassical Quantum Dynamics and Bohmian trajectories, *Notices of the AMS*, Vol 63, n. 9 (2016)
- [264] W. Steeb and Y. Hardy, *Bose, Spin and Fermi Systems*, World scientific (2015)
- [265] E. M. Stein and R. Shakarchi, *Fourier Analysis: An Introduction*, Princeton Press, (2003)

- [266] E. Stein, *Harmonic Analysis*, Princeton University Press, (1993)
- [267] F. Strocchi, *An introduction to the mathematical structure of Quantum Mechanics*, World Scientific, (2008)
- [268] L. A. Takhtajan, *Quantum Mechanics for Mathematicians*, AMS (2008)
- [269] M. Taylor, *Partial Differential Equations - Volume 2* Springer Verlag
- [270] S. Teufel, *Bohmian Mechanics: The Physics and Mathematics of Quantum Theory*, Springer Verlag (2009)
- [271] M. Terra Cunha, *Noções de Informação Quântica*, 26 Colquio Brasileiro de Matematica, (2007)
- [272] J. Thayer, *Operadores Auto-adjuntos e Equações Diferenciais Parciais*, Impa, Rio de Janeiro (1987)
- [273] M. Tomamichel, *Quantum Information Processing with Finite Resources* (2015)
- [274] R. Tumulka, *Bohmian Mechanics*, Arxiv (2017)
- [275] W. van Suijlekom, *Noncommutative Geometry and Particle Physics*, Springer (2015)
- [276] V. Vladimirov, *Equations of mathematical physics*, MIR- 1984
- [277] S. Vollinger, *Geometry of the Schrödinger equation and stochastic mass transportation*, *Journal of Mathematical Physics*, 46, (2005)
- [278] J. von Neumann (Translator: Roderich Tumulka), *Proof of the Ergodic Theorem and the H-Theorem in Quantum Mechanics*, Arxiv (2010)
- [279] Max-K. von Renesse, *An optimal transport view on Schrödinger's equation*, *Canad. Math. Bull.* 55, no. 4, 858–869 (2012)
- [280] M. W. Wong, *Weyl transforms*, Springer Verlag, (1998)

- [281] K. Yoshida, *Functional Analysis*, Oxford Press.
- [282] P. Zhang, *Wigner Measure and Semiclassical Limits of Nonlinear Schrodinger Equations*. AMS, 2008
- [283] J. Zinn-Justin, *Path Integrals in Quantum Mechanics*, Oxford Press (2005)
- [284] M. Zworski, *Semiclassical Analysis*, AMS (2012)
- [285] A. Zeilinger, R. Gähler, C. G. Shull, W. Treimer, and W. Mampe: Single-slit and double-slit diffraction of neutrons, *Rev. Mod. Phys.* 60, 1067 (1988).
- [286] M. Waldschmidt, P. Moussa, J.-M Luck and C. Itzykson, *From Number Theory to Physics*, Springer (1992)
- [287] N. Weaver, *Mathematical Quantization*, Chapman and Hall (2001)
- [288] H. Wio, *Path Integrals for Stochastic Processes*, World Scientific, (2013)
- [289] P. Woit, *Quantum Theory, Groups and Representations: an introduction - Lecture Notes*, Columbia University (2015)
- [290] W. Wrezinski, *Mecânica Clássica Moderna*, Edusp (1997)

Índice

- associação de observáveis clássicos e quânticos, 90
- autofunção, 12
- autovalor, 11
- autovalores do operador Hamiltoniano, 48
- autovetor, 11

- braket, 18

- cell problem, 169
- colapso do estado na medição, 85
- colchete de Poisson, 68, 81
- conjunto ortonormal completo, 4
- conjunto ortonormal completo de autofunções, 15
- conjunto ortonormal completo de autovetores, 15
- constante de Boltzmann, 157
- constante de Planck, 25
- convergencia na norma de operadores, 9
- convergencia no espaço das distribuições, 184
- convolução, 97
- decoerencia, 47, 58

- delta de Dirac no ponto x_0 , 44, 94, 95, 179
- densidade da posição da partícula, 36, 45
- densidade do momento da partícula, 100
- densidade do tempo de ocupação assintótica, 113
- derivada de uma distribuição, 180
- desigualdade de Cauchy-Schwarz, 3
- dimensionless, 60, 170
- dispersão de um observável, 128
- dispersão do estado, 126
- distribuição de Gibbs, 157
- distribuição Gaussiana, 93
- domínio de definição de operador, 21

- energia do operador Hamiltoniano, 51
- Energia livre, 158
- energia livre de Helmholtz, 159
- Energia média, 158
- entropia, 157
- entropia de von Neumann, 158, 161
- equação da eikonal, 172

- equação de Euler-Lagrange, 121
- equação de Hamilton, 34, 68
- equação de Hamilton-Jacobi, 168
- equação de Hamilton-Jacobi estacionária, 169
- equação de Schrodinger, 36
- equação de Schrodinger numa variedade Riemanniana, 122
- equação do transporte, 165, 166
- espaço de Hilbert, 3
- espaço de Hilbert separável, 5
- espaço de Sobolev, 119
- espaço normado completo, 3
- espectro contínuo, 13
- espectro de operador, 11
- espectro pontual, 12
- estado, 35
- estado estacionário, 48
- estado KMS, 159
- estado puro, 146
- estados coerentes, 47
- evolução temporal de observável segundo o ponto de vista de Heisenberg, 87
- evolução temporal de operador densidade, 148
- evolução temporal do estado inicial, 49
- evolução temporal do valor esperado de um estado inicial, 80
- evolução temporal segundo a equação de Schrödinger, 44
- experimento da dupla fenda, 57
- exponencial de operador, 19
- exponencial de operador não limitado, 21
- expressão de Van Vleck para a densidade, 176
- expressão integral para a evolução temporal da partícula livre, 104
- função de onda, 36
- função de quadrado integrável, 5
- função generalizada, 179
- função teste, 179
- funções de Schwartz, 184
- geodésica, 121
- ground state, 51
- Hamiltoniano clássico, 33
- Helgason kernel, 122
- identidade da polarização, 98
- interferômetro de Ramsey, 58
- interferência, 54, 56, 58
- interpretação estocástica da Mecânica Quântica, 165
- interpretação hidrodinâmica da Mecânica Quântica, 165
- inverso de operador, 8
- Lei de Newton, 34
- limite semiclássico, 53, 59, 170
- limites clássicos de um nível de energia, 115
- métrica Riemanniana, 121
- Mecânica de Bohm, 165
- Mecânica Estatística Quântica, 158
- medição, 51

- medição da energia de um estado via o Hamiltoniano, 75
- medição e autovalor, 74
- medição e espectro, 49, 74
- multiplicidade do autovalor, 11
- níveis de energia do Hamiltoniano quântico, 49
- núcleo de operador, 8
- norma, 2
- norma do operador, 9
- norma em \mathcal{L}^2 , 6
- o comutador de dois operadores, 64
- o operador Hamiltoniano associado a um potencial periódico unidimensional, 117
- o operador Hamiltoniano do oscilador harmônico, 72
- observável clássico, 83
- observável quântico, 83
- onda plana, 107
- operador adjunto, 9
- operador autoadjunto, 10
- operador compacto, 14
- operador da classe Hilbert-Schmidt, 153
- operador densidade, 141
- operador densidade KMS, 159, 161
- operador Hamiltoniano associado a um campo eletromagnético externo, 123
- operador Hamiltoniano quantizado, 39, 40
- operador injetivo, 8
- operador Integral, 29, 107
- operador inversível, 8
- operador Laplaciano, 28, 39
- operador Laplaciano associado a métrica hiperbólica no semiplano superior, 122
- operador Laplaciano associado a uma métrica Riemanniana, 121
- operador limitado, 8
- operador linear, 7
- operador momento, 26, 27
- operador momento ao quadrado, 27
- operador multiplicação por coordenada, 23
- operador Multiplicação por uma função, 24
- operador positivo, 31
- operador projeção, 10
- operador projeção ortogonal, 10
- operador simétrico, 22
- operador sobrejetivo, 8
- operador Trace Class, 150
- operador unitário, 10
- operadores que comutam, 89
- operadores simultaneamente diagonalizáveis, 90
- pacote de onda Gaussiano, 133
- partícula livre num intervalo, 115
- ponto de vista de Heisenberg, 87
- ponto de vista de Schrödinger, 86

- POSTULADO 1, 43
 POSTULADO 2, 74
 POSTULADO 3, 82
 POSTULADO 4, 85
 POSTULADO 5, 88
 POSTULADO 6, 90
 POSTULADO 7, 100
 potencial quântico, 173
 preparação de um estado, 87
 Princípio da incerteza de Heisenberg, 101, 131
 probabilidade da medição de um estado segundo um observável, 76
 probabilidade da ocorrência de autovalor, 89
 Problema de Sturm-Liouville, 52, 117
 produto interno, 2
 produto interno de operadores da classe Hilbert-Schmidt, 155
 Produto interno em \mathcal{L}^2 , 6, 35
 projeção ortogonal, 17
 propagador, 46

 quantização de observável clássico, 83
 quantização do oscilador harmônico, 109

 raiz quadrada de operador positivo, 32
 resolvente de um operador, 13

 sequência convergente, 3
 sequência de Cauchy, 3
 solução KAM fraca da equação de Hamilton-Jacobi, 173

 tempo de ocupação assintótica da partícula clássica, 112
 Teorema da decomposição espectral, 15
 Teorema de Ehrenfest, 80
 Teorema de Plancherel, 93
 Teorema de Van Vleck, 176
 Teorema Ergódico Quântico de von Neumann, 47
 Teorema Espectral, 13
 Teorema espectral para o operador Hamiltoniano no caso periódico unidimensional, 53
 toro de dimensão n , 6
 traço, 140
 traço de operador, 138
 transformada de Fourier, 92, 93
 transformada de Fourier da delta Dirac, 186
 transformada de Fourier de distribuição, 185
 transformada de Fourier inversa, 95
 tunelamento, 110, 115

 valor esperado da posição da partícula num estado, 71
 valor esperado de observável segundo operador densidade, 143
 valor esperado de um estado, 125
 valor esperado de um estado via um operador autoadjunto, 71

- valor esperado do momento de
uma partícula num es-
tado, 72
- valor esperado do observável clássico,
82
- valor esperado do operador Hamil-
toniano num estado,
73
- valor médio da posição da partícula,
41
- variedade diferenciável, 6