



FUNDAMENTOS TEÓRICOS DE MECÂNICA QUÂNTICA

Lucas R. Ximenes

Felipe Gimenez S.

Alexandre A. Suaide



Com o propósito de proporcionar uma introdução inicial à mecânica quântica, este livro didático aborda de forma abrangente os conceitos fundamentais da disciplina. Partindo desde os princípios básicos, como espaços de Hilbert, e avançando para ferramentas mais avançadas, como a teoria de perturbação (independente e dependente do tempo), teoria de espalhamento e um breve capítulo sobre mecânica quântica relativística. O texto abrange desde resultados teóricos cruciais até exemplos experimentais da teoria, como o Experimento de Stern-Gerlach e experimentos relacionados à detecção de neutrinos.

Dirigindo-se a estudantes que tenham uma compreensão de nível de graduação em física, este livro busca ser acessível a uma ampla gama de leitores interessados em explorar o campo da mecânica quântica.

O livro oferece uma variedade de exemplos ao longo do texto e inclui inúmeros exercícios e leituras adicionais ao final de cada capítulo. Isso permite aos estudantes aprimorar e praticar os métodos apresentados. Baseando-se em cursos de graduação em mecânica quântica, os autores se esforçam para apresentar os conceitos de maneira didática, mantendo o formalismo e a elegância da teoria. Isso atende às necessidades dos alunos que desejam aprender, seja de forma independente ou como parte de um curso de mecânica quântica.

Lucas Roda Ximenes dos Santos Descrição do Jimeens de 3 ou 4 linhas.

Felipe Gimenez Souza Descrição do Felps de 3 ou 4 linhas.

Alexandre Alarcon do Passo Suaide Descrição do Suaide de 3 ou 4 linhas.

Fundamentos Teóricos de Mecânica Quântica

Lucas R. Ximenes

Felipe Gimenez

Alexandre A. Suaide

Nome da Editora

(Título da editora), Rua da editora 1234, São Paulo – Brasil

Publicação ainda não feita e não confirmada

O local da editora responsável será colocado aqui

É dever e obrigação de todas as Universidades disseminar o conhecimento em prol da educação, aprendizado e pesquisa afim de levar excelência à ciência.

www5.usp.br

Mais informações sobre este título: www.site.com.br/numero-do-ISBN

© L.R. Ximenes, F. Gimenez e A.A. Suaide 2024

Esta publicação está protegida por direitos autorais. Sujeito a exceções estatutárias e a acordos de licenciamento coletivo relevantes, nenhuma reprodução de qualquer parte pode ocorrer sem a permissão por escrito da (Nome da editora).

Primeira publicação em (talvez 2024)

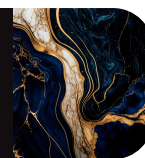
Impresso e encadernado no Brasil por (empresa responsável).

ISBN 123-4-567-89101-1 eBook (nome da biblioteca online)

ISBN 123-4-567-89101-1 Capa dura

A (nome da editora) não se responsabiliza pela persistência ou precisão dos URL's de sites externos ou de terceiros mencionados nesta publicação e não garante que o conteúdo de tais sites seja ou permanecerá preciso ou apropriado.

Sumário



<i>Prefácio</i>	ii
<i>Abreviações e notações</i>	iv
Parte I Fundamentos básicos	1
1 Introdução à mecânica quântica	3
1.1 Espaço de Hilbert	4
1.1.1 Base ortonormal em um espaço vetorial euclidiano	5
1.1.2 Notação de Dirac e o espaço de bra-kets	8
1.1.3 Definição do espaço de Hilbert	13
1.1.4 Bases contínuas	17
<i>Produto escalar em estados contínuos</i>	17
<i>Vetor de estado e projeção para estados contínuos</i>	17
<i>Introdução ao espaço de posições e a função de onda</i>	17
<i>Condição de quadrado integrável</i>	17
1.2 Mudança de base	17
1.3 Operadores em Mecânica Quântica	21
1.3.1 Medidas em Mecânica Quântica	22
1.3.2 Operadores hermitianos	25
1.3.3 Medidas simultâneas	28
1.4 Operadores de posição e momento	35
1.4.1 O operador de posição	35
1.4.2 O operador de momento	36
1.4.3 O comutador posição–momento	36
1.5 Mudança de base de representação	37
1.6 Evolução temporal	37
1.6.1 Descrição de Schrödinger	37
1.6.2 Descrição de Heisenberg	37
1.7 Relação de incerteza entre energia–tempo	37
<i>Leitura complementar</i>	37
<i>Exercícios</i>	37
2 Aplicações dos conceitos básicos	39
2.1 Experimento de Stern–Gerlach	39
2.1.1 Operadores de dipolo magnético	39

2.2	Detecção de neutrinos	39
2.2.1	Experimento de Reines–Cowan (1953)	39
2.2.2	Experimento de Homestake (1953)	39
2.2.3	Super–K e SNO (2001)	39
2.2.4	Mundo simplificado: 2 tipos de neutrinos	39
2.3	O oscilador harmônico	39
2.3.1	Oscilador harmônico clássico	39
2.3.2	Oscilador harmônico quântico	39
2.3.3	A função de onda	40
	<i>Leitura complementar</i>	40
	<i>Exercícios</i>	40
Parte II	Fundamentos Intermediários	41
3	Mecânica Quântica em 3D	43
4	Sistemas de partículas idênticas	45
5	Teoria de perturbação	47
5.1	Independente do tempo	47
5.2	Dependente do tempo	47
Parte III	Fundamentos Avançados	49
6	Mecânica quântica relativística	51
6.1	Sistemas de unidades naturais	52
6.2	Recordando relatividade restrita	54
6.2.1	Transformações de Lorentz	55
6.3	A equação de Klein–Fock–Gordon	59
6.4	A equação de Dirac	64
Parte IV	Desenhos (Apagar isso)	73
	Bibliografia	81

Prefácio



Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetur id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

Nam dui ligula, fringilla a, euismod sodales, sollicitudin vel, wisi. Morbi auctor lorem non justo. Nam lacus libero, pretium at, lobortis vitae, ultricies et, tellus. Donec aliquet, tortor sed accumsan bibendum, erat ligula aliquet magna, vitae ornare odio metus a mi. Morbi ac orci et nisl hendrerit mollis. Suspendisse ut massa. Cras nec ante. Pellentesque a nulla. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Aliquam tincidunt urna. Nulla ullamcorper vestibulum turpis. Pellentesque cursus luctus mauris.

Nulla malesuada porttitor diam. Donec felis erat, congue non, volutpat at, tincidunt tristique, libero. Vivamus viverra fermentum felis. Donec nonummy pellentesque ante. Phasellus adipiscing semper elit. Proin fermentum massa ac quam. Sed diam turpis, molestie vitae, placerat a, molestie nec, leo. Maecenas lacinia. Nam ipsum ligula, eleifend at, accumsan nec, suscipit a, ipsum. Morbi blandit ligula feugiat magna. Nunc eleifend consequat lorem. Sed lacinia nulla vitae enim. Pellentesque tincidunt purus vel magna. Integer non enim. Praesent euismod nunc eu purus. Donec bibendum quam in tellus. Nullam cursus pulvinar lectus. Donec et mi. Nam vulputate metus eu enim. Vestibulum pellentesque felis eu massa.

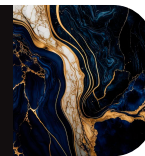
Quisque ullamcorper placerat ipsum. Cras nibh. Morbi vel justo vitae lacus tincidunt ultrices. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. In hac habitasse platea dictumst. Integer tempus convallis augue. Etiam facilisis. Nunc elementum fermentum wisi. Aenean placerat. Ut imperdiet, enim sed gravida sollicitudin, felis odio placerat quam, ac pulvinar elit purus

eget enim. Nunc vitae tortor. Proin tempus nibh sit amet nisl. Vivamus quis tortor vitae risus porta vehicula.

Fusce mauris. Vestibulum luctus nibh at lectus. Sed bibendum, nulla a faucibus semper, leo velit ultricies tellus, ac venenatis arcu wisi vel nisl. Vestibulum diam. Aliquam pellentesque, augue quis sagittis posuere, turpis lacus congue quam, in hendrerit risus eros eget felis. Maecenas eget erat in sapien mattis porttitor. Vestibulum porttitor. Nulla facilisi. Sed a turpis eu lacus commodo facilisis. Morbi fringilla, wisi in dignissim interdum, justo lectus sagittis dui, et vehicula libero dui cursus dui. Mauris tempor ligula sed lacus. Duis cursus enim ut augue. Cras ac magna. Cras nulla. Nulla egestas. Curabitur a leo. Quisque egestas wisi eget nunc. Nam feugiat lacus vel est. Curabitur consectetur.

Suspendisse vel felis. Ut lorem lorem, interdum eu, tincidunt sit amet, laoreet vitae, arcu. Aenean faucibus pede eu ante. Praesent enim elit, rutrum at, molestie non, nonummy vel, nisl. Ut lectus eros, malesuada sit amet, fermentum eu, sodales cursus, magna. Donec eu purus. Quisque vehicula, urna sed ultricies auctor, pede lorem egestas dui, et convallis elit erat sed nulla. Donec luctus. Curabitur et nunc. Aliquam dolor odio, commodo pretium, ultricies non, pharetra in, velit. Integer arcu est, nonummy in, fermentum faucibus, egestas vel, odio.

Abreviações e notações



- Vetores são escritos em **negrito**: \mathbf{v}
- Vetores unitários (versores) são denotados por \mathbf{e}_i
- Produtos internos (fora da notação de Dirac) são escritos por $\langle \cdot, \cdot \rangle$
- Operadores são sempre escritos com um acento circunflexo: $\hat{\mathcal{A}}$
- Operador ou matriz unitária é da forma $\mathbb{1}$, em particular, algumas vezes enfatiza-se a dimensão d por $\mathbb{1}_{d \times d}$
- O conjunto dos naturais é $\mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\}$ e o conjunto dos naturais incluindo o zero é denotado por \mathbb{N}_0
- Produtos vetoriais e cartesianos são denotados com \times
- Produtos tensoriais são denotados com \otimes
- Coordenadas cartesianas são denotadas por (x, y, z)
- Coordenadas cilíndricas são denotadas por (r, ϕ, z)
- Coordenadas esféricas são denotadas por (r, ϕ, θ)
- Complexos conjugados são denotados por z^*
- O símbolo de Levi-Civita é $\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & , \text{permutação par de } ijk \\ -1 & , \text{permutação ímpar de } ijk \\ 0 & , \text{índices iguais} \end{cases}$
- O delta de Kronecker é $\delta_{ij} = \begin{cases} +1 & , i = j \\ 0 & , i \neq j \end{cases}$
- O delta de Dirac é $\delta(x - x') = \begin{cases} \infty & , x = x' \\ 0 & , x \neq x' \end{cases}$
- Equivalências são denotadas por \equiv
- Definições são denotadas por $:=$

- Mapeamentos entre elementos de um conjunto são denotados por \mapsto
- Mapeamentos entre conjuntos são denotados por \rightarrow
- Valores esperados são denotados por $\langle \cdot \rangle$
- Alguns fatores de conversão de unidades:

$$- 1 \text{ eV} = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$- 1 \text{ J} = 6.242 \cdot 10^{18} \text{ eV}$$

$$- 1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$$

- Alguns valores de constantes físicas:

$$- c = 2.998 \cdot 10^8 \text{ m/s} \quad (\text{velocidade da luz no vácuo})$$

$$- e = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C} \quad (\text{carga do elétron})$$

$$- h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} \quad (\text{constante de Planck})$$

$$\begin{aligned} - \hbar &= h/2\pi && (\text{constante de Planck reduzida}) \\ &= 1.055 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} \\ &= 0.658 \cdot 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} - k_b &= 1.381 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} && (\text{constante de Boltzmann}) \\ &= 8.617 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K} \end{aligned}$$

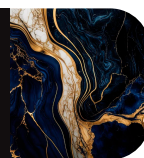
$$\begin{aligned} - m_e &= 9.109 \cdot 10^{-31} \text{ kg} && (\text{massa de repouso do elétron}) \\ &= 0.511 \text{ MeV}/c^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} - m_p &= 1.672 \cdot 10^{-27} \text{ kg} && (\text{massa de repouso do próton}) \\ &= 938.3 \text{ MeV}/c^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} - m_n &= 1.675 \cdot 10^{-27} \text{ kg} && (\text{massa de repouso do nêutron}) \\ &= 939.6 \text{ MeV}/c^2 \end{aligned}$$

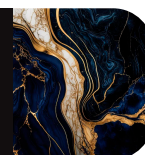
$$- \varepsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2/\text{Nm}^2 \quad (\text{permissividade elétrica do vácuo})$$

PARTE I



FUNDAMENTOS BÁSICOS

Introdução à mecânica quântica



Durante muitos anos, ficou estabelecido que a física era uma ciência próxima de sua conclusão, em que haviam apenas algumas lacunas a serem preenchidas. Um dos fenômenos de onde originavam questionamentos era o da “*radiação de corpo negro*”, que foi profundamente estudada por grandes cientistas que viriam a se tornar os “*pais*” da mecânica quântica. Nomes como Kirchhoff¹, Wien², Planck³, Einstein⁴ e muitos outros se tornaram muito importantes ao longo de seus estudos sobre esse fenômeno.

Em especial Planck, quando em 1900 apresentou quatro artigos propondo resoluções para o problema da radiação de corpo negro. Em seu primeiro artigo, Planck (1900a) expressava uma nova equação, que em suas palavras, representava a “*lei da distribuição de energia de radiação em todo o espectro*”, sendo ela dada por

$$E = \frac{C\lambda^{-5}}{e^{c/\lambda T} - 1}$$

onde λ é o comprimento de onda, c a velocidade da luz, T a temperatura e C uma constante. Em seus próximos 3 artigos, Planck (1900b,c,d), ele viria a desenvolver e determinar mais resultados que culminariam em muitos outros fenômenos que se originaram do estudo aprofundado deste problema. Alguns de grande renome são: Efeito fotoelétrico, Efeito Compton⁵, descoberta dos raios-X por Röntgen⁶, e muitos outros de extrema importância que podem ser estudados com mais profundidade em livros como Eisberg e Resnick (1985), que contextualizam muito bem historicamente o surgimento da mecânica quântica e muitos dos experimentos que solidificaram a teoria.

¹Gustav Robert Kirchhoff (1824–1887).

²Wilhelm Carl Werner Otto Fritz Franz Wien (1864–1928).

³Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858–1947).

⁴Albert Einstein (1879–1955).

⁵Arthur Holly Compton (1892–1962).

⁶Wilhelm Conrad Röntgen (1845–1923).

Neste livro, abordaremos as bases para um estudante de mecânica quântica, começando por exemplo com a definição de estados quânticos, operadores e como utilizamos eles para descrever fenômenos quânticos, o que são espaços de Hilbert⁷, como o tempo evolui quanticamente e muitos outros conteúdos que exigem uma boa base de Álgebra Linear e todo o ciclo básico de um curso de física. Um curso introdutório de física quântica também é útil para contextualizar alguns conteúdos que veremos mais adiante.

Em um contexto geral, podemos descrever qualquer sistema quântico completamente utilizando-se de cinco princípios não-triviais.

- Um sistema quântico é caracterizado por um **vetor de estado** $|\psi\rangle$;
- Todo observável A é representado por um **operador hermitiano** \hat{A} ;
- O processo de medida é descrito através da atuação de um operador sobre o estado e resulta sempre em um **autovalor** do operador;
- O **valor esperado** de um observável \hat{A} é dado por:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

- Um sistema quântico evolui no tempo de acordo com a equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

Obviamente que esses princípios básicos não são as únicas ferramentas que utilizamos na descrição da teoria quântica, no entanto eles são essenciais para entender qualquer outro artifício que iremos aplicar, como por exemplo teoria de perturbações, que utiliza-se basicamente de todos esses princípios.

1.1 Espaço de Hilbert

Classicamente, quando consideramos um sistema em um certo instante de tempo t e sabemos como descrever a posição \mathbf{r} e a velocidade \mathbf{v} , conseguimos caracterizar completamente o estado da partícula.

Exemplo 1.1:

Suponha que uma partícula clássica esteja em t_0 na posição \mathbf{r}_0 com velocidade $v_0 = 0$ e aceleração constante \mathbf{a} . Sabendo que essa partícula

⁷David Hilbert (1862–1943).

esteja com $\mathbf{v} = v_x \mathbf{e}_x + v_y \mathbf{e}_y + v_z \mathbf{e}_z$ em $t \neq t_0$, qual será o vetor \mathbf{r} no instante de tempo t ?

Utilizando a equação horária do movimento, podemos determinar a posição da partícula facilmente, tal que

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}_0 t + \frac{1}{2} \mathbf{a} t^2$$

Em sistemas quânticos a situação é outra. A variável temporal t torna-se um objeto matemático vinculado a uma distribuição de probabilidade, e esta distribuição está diretamente relacionada ao **vetor de estado** $|\psi\rangle$.

Resumidamente um vetor de estado $|\psi\rangle$ é um vetor em um espaço de Hilbert que armazena todas as informações do estado da partícula associada a ele. Para entender um pouco melhor, vamos entender o que é um “*espaço de Hilbert*”.

1.1.1 Base ortonormal em um espaço vetorial euclidiano

Começemos relembando rapidamente o funcionamento de um espaço vetorial euclidiano. Por definição, um espaço vetorial é da seguinte forma:

Definição 1.1. *Um espaço vetorial \mathbb{V} sobre um corpo \mathbb{K} (exemplos de corpos são \mathbb{C} , \mathbb{R} , \mathbb{Q} e muitos outros) é um conjunto de elementos, chamados de vetores, dotado de uma operação de soma vetorial $+$: $\mathbb{V} \times \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{V}$ e um produto por escalar \cdot : $\mathbb{K} \times \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{V}$ tal que:*

1. Para cada par de vetores $\mathbf{v}, \mathbf{u} \in \mathbb{V}$, associa-se um elemento de soma $(\mathbf{v} + \mathbf{u}) \in \mathbb{V}$ com as seguintes propriedades:
 - (a) *Comutatividade: a soma é comutativa para todo $\mathbf{v}, \mathbf{u} \in \mathbb{V}$: $\mathbf{v} + \mathbf{u} = \mathbf{u} + \mathbf{v}$;*
 - (b) *Associatividade: a soma é associativa para todo $\mathbf{v}, \mathbf{u}, \mathbf{w} \in \mathbb{V}$: $\mathbf{v} + (\mathbf{u} + \mathbf{w}) = (\mathbf{v} + \mathbf{u}) + \mathbf{w}$;*
 - (c) *Vetor nulo: existe um único vetor $\mathbf{0}$ denominado vetor nulo, tal que para todo $\mathbf{v} \in \mathbb{V}$: $\mathbf{v} + \mathbf{0} = \mathbf{v}$;*
 - (d) *Vetor simétrico: Para cada $\mathbf{v} \in \mathbb{V}$, existe um único elemento $-\mathbf{v} \in \mathbb{V}$ tal que $\mathbf{v} + (-\mathbf{v}) = \mathbf{0}$.*
2. Para cada par $\alpha \in \mathbb{K}$ e $\mathbf{v} \in \mathbb{V}$, existe um vetor associado $\alpha \cdot \mathbf{v} \in \mathbb{V}$, chamado de produto por escalar, com as seguintes propriedades:

- (a) *Associatividade:* o produto por escalares é associativo para todo $\alpha, \beta \in \mathbb{K}$ e $\mathbf{v} \in \mathbb{V}$: $\alpha \cdot (\beta \cdot \mathbf{v}) = (\alpha \cdot \beta) \cdot \mathbf{v}$;
- (b) *Elemento unitário:* existe um elemento unitário $1 \in \mathbb{K}$ tal que para todo $\mathbf{v} \in \mathbb{V}$: $1 \cdot \mathbf{v} = \mathbf{v}$;
- (c) *Distributividade vetorial:* para todo $\alpha \in \mathbb{K}$ e $\mathbf{v}, \mathbf{u} \in \mathbb{V}$, o produto por escalares é distributivo em relação à soma de vetores: $\alpha \cdot (\mathbf{v} + \mathbf{u}) = \alpha \cdot \mathbf{v} + \alpha \cdot \mathbf{u}$;
- (d) *Distributividade escalar:* para todo $\alpha, \beta \in \mathbb{K}$ e $\mathbf{v} \in \mathbb{V}$, o produto por escalares é distributivo em relação à soma de escalares: $(\alpha + \beta) \cdot \mathbf{v} = \alpha \cdot \mathbf{v} + \beta \cdot \mathbf{v}$.

Para termos um espaço vetorial euclidiano é necessário que o espaço vetorial seja finito, real e tenha nele definido um produto interno. Um primeiro conceito fundamental num espaço vetorial \mathbb{V} é sua base, o conjunto de vetores linearmente independente $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\} \in \mathbb{V}$ que gera esse espaço:

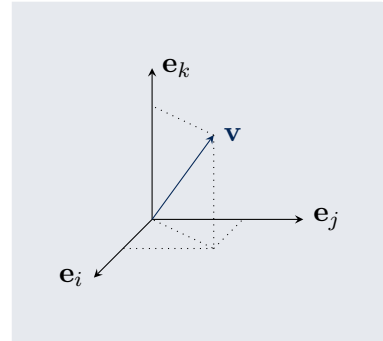
$$\mathbf{v} = a_1 \mathbf{v}_1 + a_2 \mathbf{v}_2 + \dots + a_n \mathbf{v}_n, \quad \mathbf{v} \in \mathbb{V}, \quad \{a_1, a_2, \dots, a_n\} \in \mathbb{R}$$

Um exemplo usual dessas bases se dá quando consideramos um espaço euclidiano \mathbb{R}^3 e a representação de um vetor $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^3$ qualquer neste espaço. Comumente representamos \mathbf{v} conforme os sistemas de coordenadas (a base) que nos são convenientes, como por exemplo as coordenadas:

Cartesianas: $\mathbf{v} = v_x \mathbf{e}_x + v_y \mathbf{e}_y + v_z \mathbf{e}_z$

Cilíndricas: $\mathbf{v} = v_r \mathbf{e}_r + v_\phi \mathbf{e}_\phi + v_z \mathbf{e}_z$

Esféricas: $\mathbf{v} = v_r \mathbf{e}_r + v_\theta \mathbf{e}_\theta + v_\phi \mathbf{e}_\phi$



Vale lembrar que independente do sistema de coordenadas escolhido, o vetor \mathbf{v} é sempre o mesmo, a base forma apenas uma representação deste vetor.

Nos exemplos acima, as bases utilizadas foram $\{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\}$ (cartesiana), $\{\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\phi, \mathbf{e}_z\}$ (cilíndricas) e $\{\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\phi\}$ (esféricas), os vetores que as compõem são convenientemente ortonormais, denotando-os genericamente por \mathbf{e}_i , isso significa que suas normas são 1 e que são ortogonais entre si:

$$\|\mathbf{e}_i\| = 1 \quad \& \quad \mathbf{e}_i \perp \mathbf{e}_k$$

Essas bases de representação são essencialmente o que conhecemos como versores, que variam para cada sistema de coordenadas. Bases ortonormais são mais fáceis de se trabalhar que uma base arbitrária devido às propriedades citadas acima.

Dado as vantagens contempladas, suponha agora que tenhamos uma base ortonormal de vetores de um espaço euclidiano genérico \mathbb{V} : $\{\mathbf{e}_i\} \in \mathbb{V}$ de dimensão $\dim(\mathbb{V}) = n$, podemos representar um vetor $\mathbf{v} \in \mathbb{V}$ qualquer assim como nos exemplos em \mathbb{R}^3 como uma combinação linear⁸:

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^n v_i \mathbf{e}_i \quad (1.1)$$

Podemos também definir neste exemplo o produto interno $\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle$ entre dois vetores arbitrários $\mathbf{v} \in \mathbb{V}$ e $\mathbf{u} \in \mathbb{V}$ como o produto escalar usual (o mesmo usado em \mathbb{R}^3):

$$\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle = \mathbf{v} \cdot \mathbf{u}$$

em que temos por definição que $\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle = 0$ se $\mathbf{v} \perp \mathbf{u}$.

Podemos constatar algumas propriedades⁹ referentes ao espaço vetorial \mathbb{V} . Sendo \mathbb{V} um espaço vetorial com um produto escalar, podemos definir nele uma norma através deste.

Definição 1.2. Uma norma $\|\cdot\|$ é uma função $\mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}$ com as seguintes propriedades:

- Para todo $\mathbf{v} \in \mathbb{V}$, tem-se que $\|\mathbf{v}\| \geq 0$;
- A norma $\|\mathbf{v}\| = 0 \Leftrightarrow \mathbf{v} = \mathbf{0}$;
- Para qualquer $\alpha \in \mathbb{C}$ e qualquer $\mathbf{v} \in \mathbb{B}$, vale $\|\alpha \mathbf{v}\| = |\alpha| \|\mathbf{v}\|$;
- Para quaisquer $\mathbf{v}, \mathbf{u} \in \mathbb{V}$, vale $\|\mathbf{v} + \mathbf{u}\| \leq \|\mathbf{v}\| + \|\mathbf{u}\|$.

- Para o espaço vetorial \mathbb{V} munido de um produto escalar, podemos definir uma norma da forma $\|\mathbf{v}\| = \sqrt{\langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle}$;
- Através da norma, podemos normalizar o vetor \mathbf{v} , tal que $\|\tilde{\mathbf{v}}\| = 1$, onde $\tilde{\mathbf{v}} = \frac{\mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|}$ é o vetor normalizado;
- Através do produto escalar, podemos projetar o vetor \mathbf{v} sobre um vetor da base \mathbf{e}_i , tal que obtemos a componente de \mathbf{v} nesta componente, ou seja: $\langle \mathbf{v}, \mathbf{e}_i \rangle = v_i$.

⁸Utilizaremos a notação $\{\mathbf{e}_i\}$ para expressar o conjunto de vetores \mathbf{e}_i que compõe a base.

⁹Reservaremos as demonstrações das propriedades para o capítulo seguinte, agora já se estendendo para um espaço vetorial complexo.

Perceba que as duas últimas propriedades quando aplicadas aos vetores da base (em que $\|\mathbf{e}_i\| = 1$ e $\mathbf{e}_i \perp \mathbf{e}_k \implies 0$) nos leva ao que denominamos como a função condicional delta de Kronecker¹⁰

$$\langle \mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases}$$

Além da representação que estamos usando, podemos tratar dos vetores do espaço \mathbb{V} na forma matricial, isto é, para $\mathbf{v}, \mathbf{u} \in \mathbb{V}$:

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} \quad \& \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix}$$

em que o produto interno passa a ser expresso por meio da operação de transposição \mathbf{T} :

$$\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle = \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{u} = \begin{bmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix}$$

Essas informações preliminares nos serão úteis ao passarmos para espaços vetoriais complexos e em específico o espaço de Hilbert. Antes de chegarmos no espaço de Hilbert propriamente dito, vamos definir a chamada *notação de Dirac* assim como o espaço vetorial com que trabalhamos nesta notação.

1.1.2 Notação de Dirac e o espaço de bra-kets

Em 1939, foi publicado um breve artigo de Dirac (1939)¹¹ introduzindo uma nova notação para facilitar a forma em que as equações na mecânica quântica são escritas. Esta notação foi denominada por ele como “notação de bracket”, e é comumente denotada por “notação de Dirac”.

A notação de Dirac é de extrema importância para descrevermos a mecânica quântica com eficiência e de forma intuitiva e diante disto construiremos agora dois espaços vetoriais complexos de dimensão arbitrária que chamaremos de “espaço de kets” \mathcal{V} (como veremos será especificada de acordo com o sistema físico) e “espaço de bras” \mathcal{V}^* (o motivo desta notação ficará claro adiante). Descreveremos nestes espaços vetores na forma de *kets*, denotados por $|\cdot\rangle$ e vetores na forma de *bras*, denotados por $\langle \cdot |$.

¹⁰Leopold Kronecker (1823–1891).

¹¹Paul Adrien Maurice Dirac (1902–1984).

Definição 1.3. *Seja \mathcal{V} um espaço vetorial de dimensão arbitrária sobre \mathbb{C} . O conjunto de elementos deste espaço são vetores ket da forma $|v\rangle \in \mathcal{V}$, com as seguintes propriedades:*

1. *Dois kets podem ser somados para formar um novo ket: para todo $|v\rangle, |u\rangle \in \mathcal{V}$, existe um único elemento $|w\rangle \in \mathcal{V}$ tal que $|v\rangle + |u\rangle = |w\rangle$;*
2. *A multiplicação por escalar forma um novo ket: para todo $|v\rangle \in \mathcal{V}$ e $\alpha \in \mathbb{C}$, existe um único elemento $|u\rangle \in \mathcal{V}$ tal que $|u\rangle = \alpha |v\rangle$;*
3. *Existe um ket nulo: para todo $|v\rangle \in \mathcal{V}$, quando multiplicado por $\alpha = 0$, retorna o ket nulo, que denotaremos simplesmente por 0 .*

Dentro do espaço de kets, existem kets particulares que são de suma importância para toda teoria que são os chamados “autokets” $\{|a^{(1)}\rangle, |a^{(2)}\rangle, \dots\} \equiv \{|a^{(i)}\rangle\}$, que veremos mais a frente de onde surgem, responsáveis por gerar todo o espaço. São essencialmente os conhecidos autovetores da álgebra linear.

Construído o espaço de kets \mathcal{V} , somos capazes de construir o espaço de bras \mathcal{V}^* , que é basicamente um espelho de \mathcal{V} , porém com algumas características particulares que devem ser enfatizadas para melhor compreensão do que estamos fazendo.

O espaço de bras é formalmente denominado como o “espaço dual do espaço de kets”, isto é, vai existir uma correspondência um-para-um entre \mathcal{V} e \mathcal{V}^* , chamada *correspondência dual* que pode ser vista sem qualquer rigor da seguinte forma: sendo $|v\rangle$ um elemento de \mathcal{V} e $\alpha \in \mathbb{C}$, o correspondente dual do ket $\alpha |v\rangle \in \mathcal{V}$ é o bra $\alpha^* \langle v| \in \mathcal{V}^*$. Com esta ideia em mente, a construção do espaço de bras se torna a seguinte:

Definição 1.4. *Seja \mathcal{V} um espaço vetorial de dimensão arbitrária sobre \mathbb{C} . Seja então \mathcal{V}^* o espaço dual de \mathcal{V} , cujos elementos desse espaço são vetores bra da forma $\langle v| \in \mathcal{V}^*$, com as seguintes propriedades:*

1. *Dois bras podem ser somados para formar um novo bra: para todo $\langle v|, \langle u| \in \mathcal{V}^*$, existe um único elemento $\langle w| \in \mathcal{V}^*$ tal que $\langle v| + \langle u| = \langle w|$;*
2. *A multiplicação por escalar forma um novo bra: para todo $\langle v| \in \mathcal{V}^*$ e $\alpha \in \mathbb{C}$, existe um único elemento $\langle u| \in \mathcal{V}^*$ tal que $\langle u| = \alpha \langle v|$;*
3. *Existe um bra nulo: para todo $\langle v| \in \mathcal{V}^*$, quando multiplicado por $\alpha = 0$, retorna o bra nulo, que denotaremos simplesmente por 0 .*

onde dentro deste espaço temos os “autobras” $\{\langle a^{(i)}|\}$, responsáveis por gerar todo o espaço. A título de comparação, ou seja, as correspondências duais entre \mathcal{V} e \mathcal{V}^* , temos

$$\alpha|v\rangle + \beta|u\rangle \leftrightarrow \alpha^*\langle v| + \beta^*\langle u| \quad (1.2)$$

Dizemos que o bra $\langle v|$ é a versão adjunta complexa (ou o hermitiano) do ket $|v\rangle$, sendo a operação de transposição seguida por conjugação complexa das componentes de $|v\rangle$ expressada por meio da notação *dagger* (\dagger):

$$\langle v| = (|v\rangle^*)^T \equiv |v\rangle^\dagger$$

Note que se \mathcal{V} for construído sobre \mathbb{R} , então o adjunto complexo se torna apenas a operação de transposição.

Por fim, definimos um produto interno entre dois vetores, um $|u\rangle \in \mathcal{V}$ e um $\langle v| \in \mathcal{V}^*$. Na notação de Dirac, escrevemos o bra à esquerda e o ket à direita, tal que

$$\langle v|u\rangle := (\langle v|) \cdot (|u\rangle) \quad (1.3)$$

em que este produto é em geral um número complexo

Vale ressaltar, que da mesma maneira que para um espaço vetorial nos reais, temos que se um ket $|u\rangle \in \mathcal{V}$ e um bra $\langle v| \in \mathcal{V}^*$ respeitarem

$$\langle v|u\rangle = 0$$

estes são ditos ortogonais.

Podemos da mesma forma que fizemos na seção anterior (para \mathbf{v} na base de vetores $\{\mathbf{e}_i\}$), expandir os vetores $|v\rangle \in \mathcal{V}$ e $\langle v| \in \mathcal{V}^*$ em uma base $\{|e_i\rangle\}$ e seu correspondente dual $\{\langle e_i|\}$ (sendo da mesma forma uma base ortonormal, $\langle e_i|e_k\rangle = \delta_{ik}$):

$$|v\rangle = \sum_i v_i |e_i\rangle \quad (1.4)$$

e

$$\langle v| = (|v\rangle)^\dagger = \sum_i v_i^* \langle e_i|. \quad (1.5)$$

Usemos as expansões na base $\{|e_i\rangle\}$ para demonstrar quatro propriedades facilmente deriváveis, que nos serão úteis ao longo do texto e nos permitirão praticar um pouco a nova notação:

Propriedade 1.1. *Dado um espaço de kets \mathcal{V} e seu espaço dual \mathcal{V}^* , sobre os vetores da base $\{|e_i\rangle\}$ e os correspondentes duais $\{\langle e_i|\}$, podemos projetar tanto $|v\rangle \in \mathcal{V}$ quanto $\langle v| \in \mathcal{V}^*$ nestas bases, tal que*

$$\langle e_i|v\rangle = v_i \quad \& \quad \langle v|e_i\rangle = v_i^*$$

Demonstração. Atuando com um elemento da base ortonormal $\langle e_j|$ pela esquerda em (1.4):

$$\langle e_j|v\rangle = \sum_i v_i \langle e_j|e_i\rangle = \sum_i v_i \delta_{ij} = v_j$$

e da mesma forma atuando com $|e_j\rangle$ pela direita em (1.5):

$$\langle v|e_j\rangle = \sum_i v_i^* \langle e_i|e_j\rangle = \sum_i v_i^* \delta_{ij} = v_j^*$$

■

Propriedade 1.2. Dado um espaço de kets \mathcal{V} e seu espaço dual \mathcal{V}^* , o produto escalar entre $|v\rangle \in \mathcal{V}$ e $\langle u| \in \mathcal{V}^*$ é anti-comutativo, ou seja

$$\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle^*$$

Demonstração. Aqui podemos utilizar o resultado anterior, considerando primeiramente vetor $\langle u|$ atuando sobre (1.4):

$$\langle u|v\rangle = \sum_i v_i \langle u|e_i\rangle = \sum_i v_i u_i^*$$

e da mesma forma atuando $|u\rangle$ sobre (1.5):

$$\langle v|u\rangle = \sum_i v_i^* \langle e_i|u\rangle = \sum_i v_i^* u_i = \left(\sum_i v_i u_i \right)^*$$

sendo portanto

$$\langle v|u\rangle = \langle u|v\rangle^*$$

Perceba que poderíamos chegar nessa conclusão abrindo a notação de Dirac nos vetores de notação usual

$$\langle u|v\rangle = (\mathbf{u}^*)^T \mathbf{v} = (\mathbf{u}^T \mathbf{v}^*)^* = [(\mathbf{v}^*)^T \mathbf{u}]^* = \langle v|u\rangle^*$$

■

Propriedade 1.3. Dado um espaço de kets \mathcal{V} e seu espaço dual \mathcal{V}^* , para cada vetor $|v\rangle \in \mathcal{V}$, vale que

$$\langle v|v\rangle \geq 0$$

onde $\langle v|v\rangle = 0 \Leftrightarrow |v\rangle = \mathbf{0}$. Propriedade esta conhecida como métrica definida positiva.

Demonstração. Utilizando as formas (1.4) e (1.5), temos:

$$\begin{aligned}\langle v|v\rangle &= \left(\sum_i v_i^* \langle e_i|\right) \left(\sum_i v_i |e_i\rangle\right) = \sum_{i,j} v_i^* v_j \langle e_i|e_j\rangle \\ &= \sum_{i,j} v_i^* v_j \delta_{ij} = \sum_i v_i^* v_i = \sum_i |v_i|^2 \geq 0\end{aligned}$$

Propriedade 1.4. Dado um espaço de kets \mathcal{V} e seu espaço dual \mathcal{V}^* , o produto interno de todo $|v\rangle \in \mathcal{V}$ com si mesmo é sempre um número real.

Demonstração. A partir de $\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle^*$:

$$\langle v|v\rangle = \langle v|v\rangle^*$$

o que coincide com a definição de um número real.

Note que a partir destas propriedades, podemos definir a norma $\| |v\rangle \|$ do vetor $|v\rangle$ de tal forma que seu resultado seja real e positivo (analogamente à norma euclidiana $\|\mathbf{v}\| = \sqrt{\langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle}$). Através da Propriedade 1.4, temos a norma definida por

$$\langle v|v\rangle \in \mathbb{R} \Rightarrow \| |v\rangle \| := \sqrt{\langle v|v\rangle} \quad (1.6)$$

Atente-se para o fato de que não escolhemos $\langle v|v\rangle$ de forma a não assumir valores complexos e ser positivo despropositadamente, definimos o produto como (1.6) de maneira que essa fosse uma consequência. Caso definíssemos o produto como fizemos anteriormente para os reais, isto é $\langle u|v\rangle \in \mathbb{C}$, haveria brecha para que os valores não fossem reais. O motivo da escolha do valor da norma ser real e positivo ficará claro mais a frente, ao associarmos a esta grandeza o conceito de probabilidade.

Por fim, da mesma forma que para um espaço vetorial real, se tivermos uma norma

$$\| |v\rangle \| = \sqrt{\langle v|v\rangle} = 1,$$

dizemos que o vetor está normalizado e analogamente à versão real é possível construir um vetor normalizado $|\tilde{v}\rangle \in \mathcal{V}$ a partir de sua versão original $|v\rangle \in \mathcal{V}$ (não normalizada) ao dividirmos este pela norma (caso não estejamos falando de um vetor nulo $|v\rangle = \mathbf{0}$):

$$|\tilde{v}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle v|v\rangle}} |v\rangle \implies \| |\tilde{v}\rangle \| = 1$$

1.1.3 Definição do espaço de Hilbert

Para definirmos o que chamamos de espaço de Hilbert \mathcal{H} partimos do espaço de kets \mathcal{V} (e seu dual) da última seção, isto é, um espaço vetorial linear complexo cuja dimensão é arbitrária. Impomos os seguintes postulados para que \mathcal{V} seja um espaço de Hilbert \mathcal{H} .

Definição 1.5. *Seja \mathcal{H} um espaço vetorial sobre \mathbb{C} com as características da Definição 1.3, e cujo seu dual \mathcal{H}^* satisfaz a Definição 1.4. Sejam $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ quaisquer. Para que \mathcal{H} seja um espaço de Hilbert, as seguintes propriedades devem ser satisfeitas:*

1. A norma $\| |\psi\rangle \| := \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$ deve ser real e bem definida (finita);
2. O produto interno $\langle \psi | \phi \rangle$ deve ser bem definido (finito), positivo e possuir valores em \mathbb{C} ;
3. Para cada $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, existe uma sequência de Cauchy $\{ |\psi_n\rangle \}_{n \in \mathbb{N}} \in \mathcal{H}$ tal que para todo $\varepsilon > 0$, existe pelo menos um elemento $|\psi_k\rangle$ da sequência que satisfaz $\| |\psi\rangle - |\psi_k\rangle \| < \varepsilon$;
4. O conjunto dos elementos de \mathcal{H} é um espaço vetorial completo, ou seja, toda sequência de Cauchy $\{ |\psi_n\rangle \}_{n \in \mathbb{N}} \in \mathcal{H}$ converge para um elemento do próprio \mathcal{H} .

Tendo definido o espaço de Hilbert, podemos esboçar um pouco da sua importância para a construção matemática da mecânica quântica. Ao tratarmos da mecânica clássica, todas as propriedades do estado de um sistema de n -partículas são completamente determinadas através de um único ponto $P = (x_1, \dots, x_{3n}; p_1, \dots, p_{3n})$ em um espaço de fase Ω de dimensão $6n$, onde x_i e p_i são as coordenadas e os momentos das partículas, respectivamente. No entanto, na mecânica quântica essa abordagem não é válida.

Tratando-se de um estado quântico, ele possui características únicas que diferem-se de P . Um fato é que o estado quântico não está diretamente ligado à realidade, isto é, dada uma expressão matemática para descrever o estado (como por exemplo uma função de onda, que veremos mais a frente), não teremos um objeto com significado físico, mas sim teremos uma ferramenta para fazer predições estatísticas sobre o comportamento do estado quântico. Pode não ser tão claro a primeira vista o que de fato queremos transmitir, mas esta é uma das características fundamentais da mecânica quântica! Os estados devem pertencer a um espaço arbitrário, que satisfaz condições únicas e que melhor descreve as propriedades e comportamentos dos sistemas quânticos, e este espaço é o espaço de Hilbert.

- Chamaremos, a partir de agora, os vetores $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ de *estados quânticos*.

- A grosso modo, uma sequência de Cauchy é toda sequência $\{a_n\}_{n \in \mathbb{N}}$, tal que para dois termos arbitrários da sequência a_k e a_m , vale que $\lim_{k, m \rightarrow \infty} \|a_k - a_m\| \rightarrow 0$ (repare aqui que a notação de norma define a distância entre os elementos, se os elementos forem reais, $\|a_k - a_m\| = |a_k - a_m|$).

Um exemplo de sequência de Cauchy é a sequência $\left\{\frac{1}{n}\right\}_{n \in \mathbb{N}}$, em que

$$\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{3}\right| = \frac{1}{6} > \left|\frac{1}{3} - \frac{1}{4}\right| = \frac{1}{12} > \dots > \lim_{k, m \rightarrow \infty} \left|\frac{1}{k} - \frac{1}{m}\right| = 0$$

Nos atentaremos ao longo desta seção principalmente para o postulado fundamentais (a), dado sua importância física (para mais detalhes sobre as demais condições leia o apêndice ao final do capítulo). O postulado (a) nos diz que $\langle\psi|\psi\rangle$ além de pertencer aos reais, deve ser finita e não negativa, isto é

$$0 \leq \langle\psi|\psi\rangle < \infty.$$

Essa restrição, essencialmente sobre a norma de $|\psi\rangle$, nos permite atribuir, do ponto de vista físico, uma interpretação probabilística da mecânica quântica. Matematicamente temos que as probabilidades $\{P_n\}$ ($n = 1, 2, \dots, N$) de eventos $\{\varepsilon_n\}$ ocorrerem devem respeitar duas propriedades ¹²:

- Todas as probabilidades devem ser positivas e maiores ou iguais a 0 e menor ou igual a 1:

$$0 \leq P_n \leq 1, \forall n$$

- A soma de todas as probabilidades deve ser 1 (100%):

$$\sum_i^N P_n = 1$$

Como $\| |\psi\rangle \| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$ é estritamente positiva e finita, podemos relacioná-la ao conceito de probabilidade dado que seja feita uma normalização apropriada. Sendo $|\psi'\rangle = |\psi\rangle / \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$ a versão normalizada de $|\psi\rangle$ (em que $|\psi\rangle$ não admite o estado nulo) teremos que

$$\langle\psi'|\psi'\rangle = 1 \implies \| |\psi'\rangle \| = \sqrt{\langle\psi'|\psi'\rangle} = 1$$

Se expandirmos o produto $\langle\psi'|\psi'\rangle$ conforme visto na última seção (sendo

¹²Note que podemos estender essas propriedades para o caso em que $N \rightarrow \infty$.

$\{|e_i\rangle\} \in \mathcal{H}$ uma base ortonormal),

$$|\psi'\rangle = \sum_i \psi'_i |e_i\rangle$$

podemos escrever o produto $\langle\psi'|\psi'\rangle$ como

$$\langle\psi'|\psi'\rangle = \sum_i |\psi'_i|^2 = 1$$

como a soma dos termos $|\psi'_i|^2$ deve somar 1, temos aqui que cada elemento $|\psi'_i|^2$ representa¹³ uma probabilidade do estado $|\psi'\rangle$ ser um estado em particular (analogamente à definição de probabilidade comentada anteriormente nesta seção). Conforme o que vimos na seção anterior

$$\langle e_i|\psi'\rangle = \psi'_i \implies |\langle e_i|\psi'\rangle|^2 = |\psi'_i|^2$$

logo os possíveis estados de $|\psi'\rangle$ são os elementos da base $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots\}$ e a probabilidade de $|\psi'\rangle$ atingir um estado $|e_i\rangle$ é dada pela projeção de $|\psi'\rangle$ sobre o elemento $|e_i\rangle$. Na expansão do estado $|\psi'\rangle$ os coeficientes ψ'_i estão relacionados às probabilidades de atingir o estado i e $|e_i\rangle$ é o possível estado.

Perceba que ainda não estamos tratando da evolução de $|\psi\rangle$ no tempo, os estados $\{|e_i\rangle\}$ formam todas as possibilidades do estado $|\psi\rangle$ dentro de um instante fixo. Essa é a ideia de superposição da mecânica quântica.

- Note que caso a norma não fosse finita não poderíamos normalizar o estado dado que

$$|\psi'\rangle = \frac{|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}}$$

não seria definido caso a norma fosse infinita. Se fossem admitidos números complexos ou negativos por parte de $\langle\psi|\psi\rangle$, perderíamos a interpretação probabilística da norma quadrada de $|\psi'\rangle$.

Estamos por enquanto tratando da interpretação probabilística de maneira superficial. Estamos tratando somente de estados discretos, precisamos ainda nos abranger aos estados contínuos. Não associamos ainda um sentido físico à esses possíveis estados, para isso precisamos introduzir os conceitos de operadores, autovalores e autoestados. Esta seção tem o propósito de unicamente associar a norma a uma interpretação probabilística, que nos servirá de alicerce quando tratarmos do assunto aliado a um sentido físico. Finalizaremos esta seção com um exemplo puramente ilustrativo de como pensamos em termos de probabilidade a partir de um estado $|\psi\rangle$ aplicado a uma moeda justa (sem trapaças em sua constituição):

¹³Em linguagem estatística o termo não representa a probabilidade em si, mas sim a densidade de probabilidade discreta.

Exemplo 1.2: Estados de uma moeda (versão discreto)

Realizaremos um exemplo de caráter puramente didático de forma a esboçar a relação do vetor de estado à ideia de probabilidade. Considere o experimento de um arremesso de uma moeda justa. Consideraremos que cada face desse nosso "sistema" representa um estado possível. Imagine um cenário em que os dois possíveis estados estivessem de fato em superposição após o arremesso, não sendo portanto possível distinguir em qual lado a moeda caiu.

Como sabemos, a probabilidade do evento cair cara é de 50% e o de cair corôa também 50%. Por praticidade, utilizaremos a base canônica como a base ortonormal, isto é, os estados

$$\{|e_i\rangle\} = \{|e_1\rangle, |e_2\rangle\} \left\{ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right\}$$

como deve ser de conhecimento do leitor, essa base é ortonormal. Sendo o vetor de estado dado por

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}$$

temos que a projeção do vetor da base $|e_1\rangle$ sobre o vetor de estado resulta em

$$\langle e_1|\psi\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} = \psi_1$$

como dito anteriormente ao longo desta seção, associamos as probabilidades de cada estado à grandeza $|\psi_i|^2$, sendo assim (note que a possibilidade negativa é descartada):

$$|\psi_1|^2 = |\psi_2|^2 = \frac{1}{2} \implies \psi_1 = \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Temos portanto que o vetor de estado dessa nossa versão quântica da moeda seria

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |e_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |e_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |e_2\rangle$$

em que $|e_1\rangle$ seleciona um dos estados (digamos o cara por exemplo) cuja probabilidade é fornecida pelo coeficiente ψ_1 pois $|\psi_1|^2 = 1/2$ e o estado $|e_2\rangle$ seleciona o outro (digamos que o corôa) cuja probabilidade é fornecida pelo coeficiente ψ_2 pois $|\psi_2|^2 = 1/2$. Note que como já associamos diretamente as probabilidades à $|\psi_1|^2$ e $|\psi_2|^2$, não havia necessidade de normalização, já partimos desde o princípio de que $|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 = 1$, o que não é a maneira como resolvemos os problemas

de mecânica quântica, usualmente a probabilidade de cada estado será o que descobriremos ao final e necessitaremos realizar uma normalização.

Vale ressaltar que uma moeda pertencente ao nosso ambiente macroscópico não pode representar um sistema quântico, dado que de forma mecanicista poderíamos prever o movimento a partir das condições iniciais de arremesso e obter com certeza qual dos lados ela teria caído. Ao desenvolvermos conceitos fundamentais como operadores nos próximos capítulos, seremos capazes de resolver um problema de caráter mais realista em mecânica quântica.

1.1.4 Bases contínuas

Produto escalar em estados contínuos

Vetor de estado e projeção para estados contínuos

Introdução ao espaço de posições e a função de onda

Condição de quadrado integrável

1.2 Mudança de base

Muitas vezes queremos mudar as bases de um vetor, como por exemplo passar de coordenadas cartesianas para cilíndricas ou esféricas, e para isso utilizávamos expressões que relacionavam as coordenadas, porém para bases gerais, as coisas não são tão simples assim.

Suponha que conhecemos um vetor de estado $|\psi\rangle$ em uma base ortonormal $|e_i\rangle$, ou seja

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |e_i\rangle \quad \& \quad \langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij}$$

e queremos expressar esse mesmo vetor em uma outra base ortonormal $|b_j\rangle$ tal que:

$$|\psi\rangle = \sum_j \beta_j |b_j\rangle$$

A questão é: Como calcular os elementos β_i ? E para responder isso, precisamos introduzir o conceito de *operador de projeção*.

Definição 1.6. (Operador de projeção) Dada uma base $|e_i\rangle$ qualquer, definimos o operador de projeção $\hat{\mathcal{P}}$ como sendo

$$\hat{\mathcal{P}} = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i| \quad (1.7)$$

Note que aqui temos um produto “ket–bra” e não um “bra–ket”, isso muda completamente a quantidade resultante. No caso do produto “bra–ket” como já vimos, isso nos retorna uma quantidade escalar, já o produto “ket–bra” irá nos retornar uma matriz quadrada com a dimensão dos vetores de base. Esse produto é denominado *produto direto entre vetores*.

Exemplo 1.3:

Considere o sistema de coordenadas cartesianas no espaço euclidiano \mathbb{R}^3 . Neste caso os vetores de base são:

$$|e_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \& \quad |e_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \& \quad |e_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Com isso, podemos calcular $\hat{\mathcal{P}}$ diretamente:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{P}} &= \sum_i |e_i\rangle \langle e_i| \\ &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \ 0 \ 0) + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0 \ 1 \ 0) + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0 \ 0 \ 1) \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \mathbb{1} \end{aligned}$$

Ou seja, o operador de projeção é sempre uma matriz identidade, de modo que:

$$\mathbb{1} |\psi\rangle = |\psi\rangle \quad \& \quad \langle \psi | \mathbb{1} = \langle \psi |$$

Voltemos então ao problema de transformar as componentes da base $|e_i\rangle$ para base $|b_i\rangle$. O fato da matriz de projeção ser a identidade, nos permite escrever que:

$$\hat{\mathcal{P}} = \sum_j |b_j\rangle \langle b_j| = \mathbb{1}$$

Como conhecemos $|\psi\rangle$ na base $|e_i\rangle$, o mais concreto seria começar por ele.

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_i \psi_i |e_i\rangle \\ &= \sum_i \psi_i \mathbb{1} |e_i\rangle = \sum_i \psi_i \sum_j |b_j\rangle \langle b_j| e_i\rangle \\ &= \sum_{i,j} \psi_i |b_j\rangle \langle b_j| e_i\rangle = \sum_j \sum_i \psi_i \langle b_j| e_i\rangle |b_j\rangle \end{aligned}$$

► Adicionar a matriz de projeção à expressão de $|\psi\rangle$ implica em dizermos que estamos projetando o elemento j do vetor de base $|e_i\rangle$ no vetor de base $|b_j\rangle$.

Dessa forma, como queremos escrever $|\psi\rangle = \sum_j \beta_j |b_j\rangle$, podemos comparar os resultados

$$|\psi\rangle = \sum_j \beta_j |b_j\rangle \quad \& \quad |\psi\rangle = \sum_j \sum_i \psi_i \langle b_j| e_i\rangle |b_j\rangle$$

e concluir que:

$$\beta_j = \sum_i \psi_i \langle b_j| e_i\rangle$$

Expandindo um pouco essa ideia, existem vetores de estado que podem ser escritos em bases de dimensão infinita, isto é, a base torna-se um contínuo de vetores de base, de modo que:

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |e_i\rangle \rightarrow |\psi\rangle = \int \psi(\xi) |\xi\rangle d\xi$$

Exemplo 1.4:

Um exemplo importante que envolvem bases contínuas, é a “base de autoestados de posição”, tal que dado um vetor de base $|x\rangle \in \{|x\rangle\}$, que designará um vetor posição e outro vetor de base $|x'\rangle \in \{|x\rangle\}$, a base de autoestados satisfaz que:

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x' - x) \rightarrow \text{Delta de Dirac}$$

Delta de Dirac

- Uma das propriedades principais da Delta de Dirac se dá a partir de integrais:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x') \delta(x - x') dx' = f(x)$$

Outra propriedade importante é que para $x = 0$, sendo a função delta par, $\delta(x - x') = \delta(x')$, temos que:

$$\delta(x') = 0, \quad \forall x' \neq 0$$

Para mais detalhes acerca deste recurso matemático, recomendamos a leitura disponível em Arfken e Weber (2000) e Barata (2023b)

Dessa forma, qual seria o valor de um vetor de estado $|\psi\rangle$ qualquer na componente $|x\rangle$ da base $\{|x\rangle\}$? Constata-se facilmente que

$$\begin{aligned} \langle x|\psi\rangle &= \langle x| \int \psi(x') |x'\rangle dx' \\ &= \int \psi(x') \langle x|x'\rangle dx' \\ &= \int \psi(x') \delta(x - x') dx' = \psi(x) \end{aligned}$$

Uma consequência super importante que desenvolvemos neste simples exemplo é o fato de que para determinar a função de onda de uma partícula, ou de um sistema de partículas, em uma base qualquer de autoestados $\{|x\rangle\}$, basta calcular

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle \quad (1.8)$$

Temos nesse exemplo a ideia de operador intrínseca no problema, vamos então definir o que são e por que eles se relacionam com este exemplo.

- Antes de prosseguir, vale salientar que no Apêndice ?? há uma discussão mais aprofundada sobre espaços de Hilbert e algumas de suas propriedades essenciais para mecânica quântica.

1.3 Operadores em Mecânica Quântica

Finalmente definiremos o que são operadores e o porque dessa ferramenta ser tão útil no desenvolvimento de toda teoria quântica. Grande parte de sua importância se dá pelo fato de que muita informação pode ser armazenada em um único operador e mesmo assim nenhuma propriedade essencial do sistema estudado é perdida quando desenvolvemos as contas com eles.

Definição 1.7. (Operadores) Um operador é um objeto matemático que age sobre o vetor de estado do sistema e produz outro vetor de estado. Para ser preciso, se denotarmos um operador por $\hat{\mathcal{A}}$ e $|\psi\rangle$ um elemento do espaço de Hilbert do sistema, então

$$\hat{\mathcal{A}}|\psi\rangle = |\phi\rangle$$

onde o vetor de estado $|\phi\rangle$ também pertence ao mesmo espaço de Hilbert.

É importante notar que $\langle\phi|$ não necessariamente é o vetor dual de $|\phi\rangle$! É fácil ver que isso é verdade:

Exemplo 1.5:

Consideremos o vetor de estado $|\psi\rangle$ e o operador $\hat{\mathcal{A}} \in \mathbb{R}^2$ como sendo

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad \& \quad \hat{\mathcal{A}} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}.$$

Temos então

$$\hat{\mathcal{A}}|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ax + by \\ cx + dy \end{pmatrix} := |\phi\rangle,$$

de modo que transformamos o vetor coluna $|\psi\rangle$ em outro vetor coluna $|\phi\rangle$. De forma análoga

$$\langle\psi|\hat{\mathcal{A}} = \begin{pmatrix} x^* & y^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^*a + y^*c & x^*b + y^*d \end{pmatrix} := \langle\phi|$$

em que também transformamos um “bra” em outro “bra”. Note então que o dual de $|\phi\rangle$ é

$$\langle\phi| = \begin{pmatrix} a^*x^* + b^*y^* & c^*x^* + d^*y^* \end{pmatrix},$$

portanto, podemos concluir que

$$\langle\phi| \neq \langle\phi'|.$$

Dessa forma, vemos que $\langle \phi | \hat{A}$ não é o vetor dual de $\hat{A}|\psi\rangle$. Podemos mostrar então que o vetor dual de $\hat{A}|\psi\rangle$ é dado por $\langle \psi | \hat{A}^\dagger$.

► Muitas vezes o termo \hat{A}^\dagger é denotado por “operador adjunto de \hat{A} ”.

Como os operadores são matrizes, temos que as propriedades básicas dos operadores são as mesmas das matrizes ou seja

- A soma de operadores é comutativa e associativa. Dados $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$:

$$\hat{A} + \hat{B} + \hat{C} = (\hat{A} + \hat{B}) + \hat{C} = \hat{A} + (\hat{B} + \hat{C}) = \hat{C} + \hat{A} + \hat{B}$$

- O produto é associativo, mas em geral não é comutativo. Dados $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$:

$$\hat{A}\hat{B}\hat{C} = (\hat{A}\hat{B})\hat{C} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C}) \neq \hat{C}\hat{A}\hat{B}$$

O fato dos operadores não serem comutativos, nos induz a introduzir uma operação que nos mostra se os operadores são ou não comutativos, ou seja, se a operação der zero, diremos que eles comutam.

Definição 1.8. (Comutador) Dados dois operadores \hat{A} e \hat{B} , definimos o comutador como sendo

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (1.9)$$

1.3.1 Medidas em Mecânica Quântica

Em mecânica clássica, temos que os eventos são determinísticos, de modo que conhecendo as variáveis do problema, podemos prever o resultado final do evento, ou seja, existe sempre uma equação que rege o problema. No mundo quântico a situação muda. Não existem equações que determinem exatamente o resultado final de um evento. Em mecânica quântica, as medidas são tomadas de forma completamente *probabilística*.

Em 1954, Born¹⁴ publicou um artigo, Born (1954), onde propôs que a probabilidade de ocorrência de um evento quântico está intrinsecamente atrelada ao módulo quadrado da função de onda $\psi(x)$, isto é, a probabilidade de um dado evento X ocorrer num intervalo $[x, x + dx]$, onde dx é o tamanho do detector, dado um certo conjunto de informações \mathcal{I} é dada por:

$$\mathbb{P}(X \in [x, x + dx] | \mathcal{I}) dx = |\psi(x)|^2 dx$$

¹⁴Max Born (1882–1970).

Utilizando essa ideia, dizemos que para variáveis discretas, o valor esperado de uma dada quantidade x é:

$$\langle x \rangle = \sum_i x_i \mathbb{P}(x_i | \mathcal{I})$$

Já para variáveis contínuas, analisamos a probabilidade em intervalos infinitesimais, de modo que:

$$\langle x \rangle = \int x \mathbb{P}(x | \mathcal{I}) dx = \int x |\psi(x)|^2 dx$$

Como podemos abrir $|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x)$ e comutá-los da maneira que quisermos, chegamos em:

$$\langle x \rangle = \int x \psi^*(x) \psi(x) dx = \int \psi^*(x) x \psi(x) dx$$

Que é um resultado já conhecido em cursos básicos de física quântica, mais especificamente, recomenda-se a leitura do Cap. 5 de Eisberg e Resnick (1985). Além da posição, existem outros observáveis importantes em mecânica quântica como momento ou energia, tal que é útil escrevermos o valor esperado de um observável num estado qualquer como sendo:

$$\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle = \langle \psi | \hat{\mathcal{A}} | \psi \rangle \quad (1.10)$$

Uma vez que queremos o valor esperado $\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle$, precisamos determinar quais são os elementos da matriz $\hat{\mathcal{A}}$, o que pode ser feito a partir da introdução operadores de projeção:

$$\begin{aligned} \mathbb{1} \hat{\mathcal{A}} \mathbb{1} &= \sum_i |e_i\rangle \langle e_i| \hat{\mathcal{A}} \sum_j |e_j\rangle \langle e_j| \\ &= \sum_{i,j} |e_i\rangle \langle e_i| \hat{\mathcal{A}} |e_j\rangle \langle e_j| \end{aligned}$$

Definindo o elemento de matriz $A_{ij} := \langle e_i | \hat{\mathcal{A}} | e_j \rangle$, obtemos que:

$$\hat{\mathcal{A}} = \mathbb{1} \hat{\mathcal{A}} \mathbb{1} = \sum_{i,j} \langle e_i | \hat{\mathcal{A}} | e_j \rangle |e_i\rangle \langle e_j| = \sum_{i,j} A_{ij} |e_i\rangle \langle e_j| \quad (1.11)$$

Exemplo 1.6:

Para visualizar o resultado acima, considere o espaço euclidiano \mathbb{R}^2

de tal forma que:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{A}} &= A_{11} |e_1\rangle \langle e_1| + A_{12} |e_1\rangle \langle e_2| + A_{21} |e_2\rangle \langle e_1| + A_{22} |e_2\rangle \langle e_2| \\ &= A_{11} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + A_{12} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + A_{21} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + A_{22} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}\end{aligned}$$

De cara não é fácil ver que escrever o valor esperado na forma (1.10) é o mesmo que escrever a conhecida forma integral. No entanto, para ver isso melhor, podemos analisar por exemplo o operador posição \hat{x} , de modo que consideramos o operador de projeção de uma base contínua como sendo:

$$\mathbb{1} = \int |x\rangle \langle x| dx$$

Com isso, temos que:

$$\begin{aligned}\langle \hat{x} \rangle &= \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \mathbb{1} \hat{x} \mathbb{1} | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \int |x\rangle \langle x| dx \hat{x} \int |x'\rangle \langle x'| dx' | \psi \rangle \\ &= \int \int \langle \psi | x \rangle \langle x | \hat{x} | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle dx' dx\end{aligned}$$

Note que $\langle \psi | x \rangle$ corresponde à função de onda conjugada, ou seja $\psi^*(x)$. Já $\langle x' | \psi \rangle$ é a função de onda em x' , ou seja $\psi(x')$, portanto:

$$\begin{aligned}\langle \hat{x} \rangle &= \int \int \psi^*(x) \langle x | \hat{x} | x' \rangle \psi(x') dx' dx \\ &= \int \int \psi^*(x) \hat{x} \langle x | x' \rangle \psi(x') dx' dx \\ &= \int \int \psi^*(x) \hat{x} \delta(x - x') \psi(x') dx' dx\end{aligned}$$

Separando as integrais em dx' e dx :

$$\langle \hat{x} \rangle = \int \psi^*(x) \hat{x} \underbrace{\left[\int \psi(x') \delta(x - x') dx' \right]}_{\psi(x)} dx$$

Concluimos então que:

$$\langle \hat{x} \rangle = \int \psi^*(x) \hat{x} \psi(x) dx = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle \quad (1.12)$$

1.3.2 Operadores hermitianos

Um fato importante sobre os observáveis é que o valor esperado de um operador que se relaciona diretamente a ele deve sempre ser um número real, isto é, para um dado evento A que está associado a um operador $\hat{\mathcal{A}}$, temos que:

$$\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle^* = \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle \in \mathbb{R}$$

Como consequência, podemos escrever:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle^* &= (\langle \psi | \hat{\mathcal{A}} | \psi \rangle)^* = \langle \psi |^* \hat{\mathcal{A}}^* | \psi \rangle^* \\ &= (\hat{\mathcal{A}}^* | \psi \rangle^*)^T (\langle \psi |^*)^T \\ &= \langle \psi | \hat{\mathcal{A}}^\dagger | \psi \rangle \end{aligned}$$

$$\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle = \langle \psi | \hat{\mathcal{A}} | \psi \rangle$$

Mas então, como $\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle^* = \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle$, podemos concluir que quando um operador está associado a um observável, vale que:

$$\hat{\mathcal{A}}^\dagger = \hat{\mathcal{A}} \quad (1.13)$$

Esses operadores são denominados *operadores hermitianos* e são de suma importância para a realização de uma medida em mecânica quântica, de modo que operadores hermitianos são condição necessária para caracterizar um observável.

Vamos supor então que iremos realizar um experimento qualquer no qual pretendemos medir um observável relacionado a um operador $\hat{\mathcal{A}}$, de tal forma que conseguimos determinar o valor esperado desse operador ($\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle = a$). Nesse experimento, obtemos que todas as medidas são equivalentes ao valor esperado, isto implica diretamente que a variância do valor esperado de $\hat{\mathcal{A}}$ é zero, ou seja:

$$\sigma^2 = \langle (\hat{\mathcal{A}} - \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle)^2 \rangle = 0 \Rightarrow \langle \psi | (\hat{\mathcal{A}} - \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle)^2 | \psi \rangle = 0$$

Expandindo essa relação, temos que:

$$\langle \psi | (\hat{\mathcal{A}} - \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle)^\dagger (\hat{\mathcal{A}} - \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle) | \psi \rangle = 0$$

De tal forma que podemos definir:

$$\langle \phi | := \langle \psi | (\hat{\mathcal{A}} - \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle)^\dagger \quad \& \quad | \phi \rangle := (\hat{\mathcal{A}} - \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle) | \psi \rangle$$

Portanto, para que a equação seja verdadeira:

$$\langle \phi | = 0 \quad \text{ou} \quad | \phi \rangle = 0$$

O que implica diretamente em:

$$\begin{aligned} (\hat{\mathcal{A}} - \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle) |\psi\rangle &= 0 \Rightarrow (\hat{\mathcal{A}} - a) |\psi\rangle = 0 \Rightarrow \hat{\mathcal{A}} |\psi\rangle = a |\psi\rangle \\ \langle \psi| (\hat{\mathcal{A}} - \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle)^\dagger &= 0 \Rightarrow \langle \psi| (\hat{\mathcal{A}} - a)^\dagger = 0 \Rightarrow \langle \psi| \hat{\mathcal{A}}^\dagger = \langle \psi| a^* \end{aligned}$$

Ou seja, independente do caso, caímos em uma equação de autovetores e autovalores, de modo que isso ocorre somente quando $|\psi\rangle$ for um autovetor de $\hat{\mathcal{A}}$ e a um autovalor de $\hat{\mathcal{A}}$.

Resumindo, se a variância de um observável for nula (zero) o estado do sistema é um autoestado do operador relacionado ao observável implicando que:

$$\hat{\mathcal{A}} |\psi\rangle = a |\psi\rangle \quad (1.14)$$

Teorema 1.1: Ortogonalidade de operadores hermitianos

Seja $\hat{\mathcal{A}}$ um operador hermitiano arbitrário, com autovalores $a_1, a_2 \in \mathbb{R}$ e dois autovetores (autoestados) $|1\rangle, |2\rangle \in \mathcal{H}$, onde \mathcal{H} é um espaço de Hilbert arbitrário. Os autoestados deste operador são sempre ortogonais, ou seja

$$\langle 1|2\rangle = \langle 2|1\rangle = 0$$

Demonstração. Tomemos então os seguintes resultados:

$$\langle 1| \underbrace{\hat{\mathcal{A}} |2\rangle}_{a_2 |2\rangle} = \langle 1| a_2 |2\rangle = a_2 \langle 1|2\rangle \quad (1.15)$$

$$\langle 2| \underbrace{\hat{\mathcal{A}} |1\rangle}_{a_1 |1\rangle} = \langle 2| a_1 |1\rangle = a_1 \langle 2|1\rangle \quad (1.16)$$

► Aplicando o fato de ser hermitiano: $\stackrel{h}{=}$.

Calculando então o conjugado transposto de (1.15):

$$(\langle 1| \hat{\mathcal{A}} |2\rangle)^* = \langle 2| \hat{\mathcal{A}}^\dagger |1\rangle \stackrel{h}{=} \langle 2| \hat{\mathcal{A}} |1\rangle = a_1 \langle 2|1\rangle \quad (1.17)$$

Vemos então que se $\hat{\mathcal{A}}$ for hermitiano:

$$(\langle 1| \hat{\mathcal{A}} |2\rangle)^* = \langle 2| \hat{\mathcal{A}} |1\rangle$$

Então aplicando (1.15) em 1.17:

$$\begin{aligned} (a_2 \langle 1|2\rangle)^* &= a_1 \langle 2|1\rangle \Rightarrow a_2 \langle 2|1\rangle = a_1 \langle 2|1\rangle \\ (a_2 - a_1) \langle 2|1\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Caso $a_2 = a_1$, temos um caso trivial, pois se isso ocorrer teremos que $|1\rangle = |2\rangle$, que claramente é um caso irrelevante. Portanto, se $a_2 \neq a_1$, temos obrigatoriamente que $\langle 2|1\rangle = 0$, ou seja os autoestados são ortogonais. ■

Corolário 1.1. *O conjunto de autoestados $\{|i\rangle\}$, com $i = 1, 2$, pode ser utilizado como uma base*

Vamos supor agora que tenhamos um estado $|\phi\rangle$ e um observável relacionado a um dado operador $\hat{\mathcal{A}}$ de tal forma que temos um conjunto de autoestados $|a_i\rangle$ e autovalores a_i . Escrevendo $|\phi\rangle$ em termos dos autoestados:

$$|\phi\rangle = \sum_i \phi_i |a_i\rangle$$

Com isso, queremos saber como determinar $\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle$ no estado $|\phi\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle &= \langle \phi | \hat{\mathcal{A}} | \phi \rangle = \sum_i \phi_i^* \langle a_i | \hat{\mathcal{A}} \sum_j \phi_j | a_j \rangle \\ &= \sum_{i,j} \phi_i^* \phi_j \langle a_i | \hat{\mathcal{A}} | a_j \rangle = \sum_{i,j} \phi_i^* \phi_j \langle a_i | a_j \rangle \\ &= \sum_{i,j} \phi_i^* \phi_j a_j \langle a_i | a_j \rangle = \sum_{i,j} \phi_i^* \phi_j a_j \delta_{ij} \\ &= \sum_i \phi_i^* \phi_i a_i \end{aligned}$$

$$\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle = \sum_i |\phi_i|^2 a_i$$

Imaginemos então que o estado $|\phi\rangle$ esteja normalizado, ou seja $\langle \phi | \phi \rangle = 1$:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \phi \rangle &= \sum_i \phi_i^* \langle a_i | \sum_j \phi_j | a_j \rangle \\ &= \sum_{i,j} \phi_i^* \phi_j \langle a_i | a_j \rangle \\ &= \sum_{i,j} \phi_i^* \phi_j \delta_{ij} \\ &= \sum_i \phi_i^* \phi_i \end{aligned}$$

$$\langle \phi | \phi \rangle = 1 = \sum_i |\phi_i|^2$$

Isso nos dá uma ideia de média ponderada pelas probabilidades. Voltando diretamente ao processo de medidas, temos que quando fazemos uma

única medida, vamos obter uma resposta dentre os possíveis valores de um observável, que são os *autovalores*. Ou seja, o estado $|\psi\rangle$ se transforma no autoestado correspondente ao autovalor obtido.

1.3.3 Medidas simultâneas

Para iniciar o assunto sobre a realização de medidas simultâneas em mecânica quântica, comecemos com um simples exemplo

Exemplo 1.7:

Vamos supor que tenhamos um operador \hat{A} que representa um observável e possui dois autoestados atribuídos a ele:

$$|1\rangle \rightarrow a_1 \quad \& \quad |2\rangle \rightarrow a_2$$

Seja também o vetor de estado $|\psi\rangle$ conhecido e dado por uma combinação dos autoestados, tal que:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}(2|1\rangle + |2\rangle)$$

Escrevendo $|\psi\rangle$ como um somatório podemos explicitar as componentes desse vetor de estado:

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |i\rangle \Rightarrow \begin{cases} \psi_1 = \frac{2}{\sqrt{5}} \\ \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{5}} \end{cases}$$

Com tudo isso, queremos saber o valor esperado do operador \hat{A} relacionado ao observável de interesse. Para isso, devemos primeiro saber se o vetor de estado está normalizado.

$$\begin{aligned} \langle\psi|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{5}}(2\langle 1| + \langle 2|) \frac{1}{\sqrt{5}}(2|1\rangle + |2\rangle) \\ &= \frac{1}{5}(4\langle 1|1\rangle + 2\langle 1|2\rangle + 2\langle 2|1\rangle + \langle 2|2\rangle) \end{aligned}$$

Dado então que os vetores de base $|1\rangle$ e $|2\rangle$ são ortonormais, temos que os produtos escalares $\langle 1|2\rangle = \langle 2|1\rangle = 0$, além de que $\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1$, portanto:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \frac{1}{5}(4 + 1) = 1$$

Logo o vetor de estado está normalizado e não serão necessárias constantes para normalizá-lo. Calculemos então o valor esperado $\hat{\mathcal{A}}$:

$$\begin{aligned}\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle &= \langle \psi | \hat{\mathcal{A}} | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} (2 \langle 1 | + \langle 2 |) \hat{\mathcal{A}} \frac{1}{\sqrt{5}} (2 | 1 \rangle + | 2 \rangle) \\ &= \frac{1}{5} (4 \langle 1 | \hat{\mathcal{A}} | 1 \rangle + 2 \langle 1 | \hat{\mathcal{A}} | 2 \rangle + 2 \langle 2 | \hat{\mathcal{A}} | 1 \rangle + \langle 2 | \hat{\mathcal{A}} | 2 \rangle)\end{aligned}$$

Mas como $|1\rangle$ e $|2\rangle$ são vetores de base que possuem autovalores relacionados, temos que:

$$\hat{\mathcal{A}} |1\rangle = a_1 |1\rangle \quad \& \quad \hat{\mathcal{A}} |2\rangle = a_2 |2\rangle$$

Usando isso na expressão acima, temos:

$$\begin{aligned}\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle &= \frac{1}{5} (4 \langle 1 | a_1 | 1 \rangle + 2 \langle 1 | a_2 | 2 \rangle + 2 \langle 2 | a_1 | 1 \rangle + \langle 2 | a_2 | 2 \rangle) \\ &= \frac{1}{5} (4a_1 \langle 1 | 1 \rangle + 2a_2 \langle 1 | 2 \rangle + 2a_1 \langle 2 | 1 \rangle + a_2 \langle 2 | 2 \rangle)\end{aligned}$$

$$\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle = \frac{1}{5} (4a_1 + a_2)$$

Vemos então uma ideia de média ponderada entre os valores possíveis do operador. A grosso modo, podemos dizer que a cada 5 medidas feitas, 4 serão relacionadas ao autoestado $|1\rangle$ que possui como autovalor a_1 e 1 delas relacionado ao autoestado $|2\rangle$ que possui a_2 como autovalor.

- Após a realização de uma medida, o vetor de estado $|\psi\rangle$ se torna um dos autoestados possíveis, de modo que se fizermos uma medida logo após a primeira medida, obteremos o mesmo resultado que está relacionado com o mesmo autoestado.

Exemplo 1.8:

Vamos supor que tenhamos como base $\mathcal{B} = \{|1\rangle, |2\rangle\}$, que é uma base ortonormal. Além disso, sabemos por algum motivo a forma do operador $\hat{\mathcal{B}}$ relacionado a um observável qualquer, tal que:

$$\hat{\mathcal{B}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Queremos então saber que são os autoestados do sistema, de modo a satisfazer as equações:

$$\hat{\mathcal{B}}|b_1\rangle = b_1|b_1\rangle \quad \& \quad \hat{\mathcal{B}}|b_2\rangle = b_2|b_2\rangle$$

De modo geral, para determinar os autovalores fazemos:

$$\det(\hat{\mathcal{B}} - \mathfrak{b}\mathbb{1}) = 0$$

onde \mathfrak{b} representa o conjunto de autovalores possíveis. Portanto:

$$\left| \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathfrak{b} & 0 \\ 0 & \mathfrak{b} \end{bmatrix} \right| = 0 \Rightarrow \left| \begin{bmatrix} -\mathfrak{b} & 1 \\ 1 & -\mathfrak{b} \end{bmatrix} \right| = 0 \Rightarrow \mathfrak{b}^2 - 1 = 0$$

$$b_1 = 1$$

$$b_2 = -1$$

Para o autoestado relacionado a $b_1 = 1$ é então:

$$\hat{\mathcal{B}}|b_1\rangle = 1|b_1\rangle \Rightarrow \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = 1 \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} 0 \cdot c_1 + 1 \cdot c_2 = c_1 \\ 1 \cdot c_1 + 0 \cdot c_2 = c_2 \end{cases}$$

$$c_1 = c_2 \equiv k_1$$

Então de modo geral o autoestado relacionado a b_1 pode ser escrito como sendo:

$$|b_1\rangle = k_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Afim de fazermos uma base ortonormal com os autoestados, podemos impor a normalização de modo que:

$$\langle b_1|b_1\rangle = 1 \Leftrightarrow k_1^* \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} k_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = 1 \Rightarrow 2|k_1|^2 = 1 \Rightarrow |k_1| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Sendo assim, o autoestado $|b_1\rangle$ é dado simplesmente por:

$$|b_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Analogamente para $b_2 = -1$, temos que:

$$\hat{\mathcal{B}}|b_2\rangle = -1|b_2\rangle \Rightarrow \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_3 \\ c_4 \end{bmatrix} = -1 \begin{bmatrix} c_3 \\ c_4 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} 0 \cdot c_3 + 1 \cdot c_4 = -c_3 \\ 1 \cdot c_3 + 0 \cdot c_4 = -c_4 \end{cases}$$

$$c_3 = -c_4 \equiv k_2$$

Portanto:

$$|b_2\rangle = k_2 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Normalizando:

$$\langle b_2 | b_2 \rangle = 1 \Leftrightarrow k_2^* \begin{bmatrix} 1 & -1 \end{bmatrix} k_2 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = 1 \Rightarrow 2|k_2|^2 = 1 \Rightarrow |k_2| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Logo, o autoestado $|b_2\rangle$ é dado por:

$$|b_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

► Podemos escrever tanto o operador $\hat{\mathcal{B}}$ quanto os autoestados $|b_1\rangle$ e $|b_2\rangle$ na forma de combinações lineares de *bra's* e *ket's*, tal que:

$$\hat{\mathcal{B}} = |2\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 2|$$

$$|b_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle) \quad \& \quad |b_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle)$$

Dados os exemplos acima, podemos fazer uma análise simples sobre o processo de medida em mecânica quântica. Olhando para o Exemplo 5, temos os autoestados $|1\rangle$ e $|2\rangle$ cujos autovalores relacionados são respectivamente a_1 e a_2 , já no Exemplo 6 temos os autoestados $|b_1\rangle$ e $|b_2\rangle$ compostos por uma combinação linear entre $|1\rangle$ e $|2\rangle$, e possuem autovalores b_1 e b_2 .

Vamos então supor que exista um aparelho que meça o operador $\hat{\mathcal{B}}$, de modo que ele nos retorna um dos autovalores do operador:

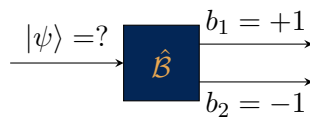


Figura 1.1: Representação esquemática de como um operador atua em sob um estado quântico.

Então se obtivermos $b_1 = 1$, teremos associado o autoestado $|b_1\rangle$ que é composto pelos vetores $|1\rangle$ e $|2\rangle$, e isto nos indica que não podemos medir os dois operadores simultaneamente, pois quando fazemos a medida de $\hat{\mathcal{B}}$,

não conseguimos determinar qual dos autoestados de $\hat{\mathcal{A}}$ teremos, isto pelo simples motivo de que $|b_1\rangle$ depende de $|1\rangle$ e $|2\rangle$.

Da mesma forma, podemos manipular $|b_1\rangle$ e $|b_2\rangle$ para isolarmos $|1\rangle$ e $|2\rangle$, tal que estes dependerão de $|b_1\rangle$ e $|b_2\rangle$, o que gera uma espécie de looping quando tentamos medir os dois operadores ao mesmo tempo.

Sabemos que com base em um vetor de estado $|\psi\rangle$, podemos calcular os valores esperados dos operadores $\hat{\mathcal{A}}$ e $\hat{\mathcal{B}}$ como sendo:

$$\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle = \langle \psi | \hat{\mathcal{A}} | \psi \rangle \quad \& \quad \langle \hat{\mathcal{B}} \rangle = \langle \psi | \hat{\mathcal{B}} | \psi \rangle$$

Com isso, medir as variâncias $\sigma_{\hat{\mathcal{A}}}^2$ e $\sigma_{\hat{\mathcal{B}}}^2$ fica inteiramente determinada, já que:

$$\sigma_{\hat{\mathcal{A}}}^2 = \langle (\hat{\mathcal{A}} - \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle)^2 \rangle \quad \& \quad \sigma_{\hat{\mathcal{B}}}^2 = \langle (\hat{\mathcal{B}} - \langle \hat{\mathcal{B}} \rangle)^2 \rangle$$

As variâncias vão nos dizer o quão boas são as medidas, se comparadas com o valor esperado, dessa forma, calcular o produto entre as variâncias nos fornecerá informações extras sobre as medidas. Antes disso, temos:

$$\begin{aligned} \sigma_{\hat{\mathcal{A}}}^2 &= \langle (\hat{\mathcal{A}} - \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle)^2 \rangle \\ &= \langle \psi | (\hat{\mathcal{A}} - \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle)^2 | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | (\hat{\mathcal{A}} - \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle)^\dagger (\hat{\mathcal{A}} - \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle) | \psi \rangle \\ &= \langle f | f \rangle \end{aligned}$$

onde $|f\rangle := (\hat{\mathcal{A}} - \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle) | \psi \rangle$. Analogamente para $\sigma_{\hat{\mathcal{B}}}^2$:

$$\begin{aligned} \sigma_{\hat{\mathcal{B}}}^2 &= \langle (\hat{\mathcal{B}} - \langle \hat{\mathcal{B}} \rangle)^2 \rangle \\ &= \langle \psi | (\hat{\mathcal{B}} - \langle \hat{\mathcal{B}} \rangle)^2 | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | (\hat{\mathcal{B}} - \langle \hat{\mathcal{B}} \rangle)^\dagger (\hat{\mathcal{B}} - \langle \hat{\mathcal{B}} \rangle) | \psi \rangle \\ &= \langle g | g \rangle \end{aligned}$$

onde $|g\rangle := (\hat{\mathcal{B}} - \langle \hat{\mathcal{B}} \rangle) | \psi \rangle$. Então o produto entre as variâncias pode ser escrito simplesmente por:

$$\sigma_{\hat{\mathcal{A}}}^2 \sigma_{\hat{\mathcal{B}}}^2 = \langle f | f \rangle \langle g | g \rangle$$

Porém, se não soubermos o vetor de estado $|\psi\rangle$, não conseguimos determinar as variâncias, tampouco o produto entre elas, dessa forma, utilizaremos a *desigualdade de Cauchy-Schwarz*, dada por:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \quad (1.18)$$

■ *Demonstração.* Dados dois vetores quaisquer $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$, podemos construir

um vetor $|\gamma\rangle$ utilizando Gram-Schmidt tal que:

$$|\gamma\rangle = |\beta\rangle - \frac{\langle\alpha|\beta\rangle}{\langle\alpha|\alpha\rangle} |\alpha\rangle$$

De modo que impomos $\langle\alpha|\alpha\rangle > 0$. Calculando então o produto escalar $\langle\beta|\gamma\rangle$, temos:

$$\begin{aligned} \langle\beta|\gamma\rangle &= \langle\beta| \left(|\beta\rangle - \frac{\langle\alpha|\beta\rangle}{\langle\alpha|\alpha\rangle} |\alpha\rangle \right) \\ &= \langle\beta|\beta\rangle - \frac{\langle\alpha|\beta\rangle}{\langle\alpha|\alpha\rangle} \langle\beta|\alpha\rangle \\ &= \langle\beta|\beta\rangle - \frac{\langle\alpha|\beta\rangle}{\langle\alpha|\alpha\rangle} (\langle\alpha|\beta\rangle)^\dagger \\ &= \langle\beta|\beta\rangle - \frac{|\langle\alpha|\beta\rangle|^2}{\langle\alpha|\alpha\rangle} \end{aligned}$$

Sendo então $\langle\beta|\gamma\rangle \geq 0$, podemos multiplicar ambos os lados por $\langle\alpha|\alpha\rangle$ e concluir que:

$$\langle\beta|\gamma\rangle \langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0$$

Portanto:

$$\langle\alpha|\alpha\rangle \langle\beta|\beta\rangle \geq |\langle\alpha|\beta\rangle|^2$$

Então aplicando (1.18):

$$\begin{aligned} \sigma_{\hat{\mathcal{A}}}^2 \sigma_{\hat{\mathcal{B}}}^2 &= \langle f|f\rangle \langle g|g\rangle \geq |\langle f|g\rangle|^2 \\ &= \left| \langle\psi| (\hat{\mathcal{A}} - \langle\hat{\mathcal{A}}\rangle)^\dagger (\hat{\mathcal{B}} - \langle\hat{\mathcal{B}}\rangle) |\psi\rangle \right|^2 \\ &= \left| \langle\psi| (\hat{\mathcal{A}} - \langle\hat{\mathcal{A}}\rangle) (\hat{\mathcal{B}} - \langle\hat{\mathcal{B}}\rangle) |\psi\rangle \right|^2 \\ &= \left| \langle\psi| \hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} - \langle\hat{\mathcal{A}}\rangle \hat{\mathcal{B}} - \langle\hat{\mathcal{B}}\rangle \hat{\mathcal{A}} + \langle\hat{\mathcal{A}}\rangle \langle\hat{\mathcal{B}}\rangle |\psi\rangle \right|^2 \\ &= \left| \langle\psi| \hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} |\psi\rangle - \langle\hat{\mathcal{A}}\rangle \langle\psi| \hat{\mathcal{B}} |\psi\rangle - \langle\hat{\mathcal{B}}\rangle \langle\psi| \hat{\mathcal{A}} |\psi\rangle + \right. \\ &\quad \left. \langle\hat{\mathcal{A}}\rangle \langle\hat{\mathcal{B}}\rangle \langle\psi|\psi\rangle \right|^2 \\ &= \left| \langle\psi| \hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} - \langle\hat{\mathcal{A}}\rangle \langle\hat{\mathcal{B}}\rangle |\psi\rangle - \langle\hat{\mathcal{A}}\rangle \langle\hat{\mathcal{B}}\rangle + \langle\hat{\mathcal{B}}\rangle \langle\hat{\mathcal{A}}\rangle \right|^2 \\ &= \left| \langle\psi| \hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} - \langle\hat{\mathcal{A}}\rangle \langle\hat{\mathcal{B}}\rangle |\psi\rangle \right|^2 \end{aligned}$$

Seja então $\hat{\mathcal{Z}} := \hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} - \langle\hat{\mathcal{A}}\rangle \langle\hat{\mathcal{B}}\rangle$ um novo operador, tal que ele não é necessariamente hermitiano, ou seja, $\langle\hat{\mathcal{Z}}\rangle \in \mathbb{C}$:

$$\langle\hat{\mathcal{Z}}\rangle = \Re[\langle\hat{\mathcal{Z}}\rangle] + i\Im[\langle\hat{\mathcal{Z}}\rangle]$$

Temos portanto que:

$$\sigma_{\hat{A}}^2 \sigma_{\hat{B}}^2 \geq |\langle \psi | \hat{Z} | \psi \rangle|^2 = |\langle \hat{Z} \rangle|^2 \geq |\Im[\langle \hat{Z} \rangle]|^2$$

Lembrando que a parte imaginária de um número complexo z pode ser escrita como sendo:

$$\Im[z] = \frac{1}{2i}(z - z^*)$$

Portanto:

$$\begin{aligned} \sigma_{\hat{A}}^2 \sigma_{\hat{B}}^2 &\geq \left| \frac{1}{2i} (\langle \hat{Z} \rangle - \langle \hat{Z}^* \rangle) \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{2i} (\langle \psi | \hat{A}\hat{B} - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle - \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger + \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle | \psi \rangle) \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{2i} \langle \psi | \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} | \psi \rangle \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{2i} \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{2^2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2 \end{aligned}$$

Logo, tirando a raiz quadrada em ambos os lados, obtemos o *princípio da incerteza entre dois operadores*:

$$\sigma_{\hat{A}} \sigma_{\hat{B}} \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \quad (1.19)$$

Esse resultado é importante devido ao fato de que caso os operadores comutem entre si, existe a possibilidade de medirmos simultaneamente os observáveis relacionados. No entanto, se não comutarem, eles nunca poderão ser medidos de forma simultânea, mesmo que o aparato de medida seja o mais tecnológico de todos. Essa restrição é intrínseca à relação de comutação entre os operadores e nada pode mudar isso.

Para a situação de precisão infinita temos um importante teorema a destacar:

Teorema 1.2: Base entre operadores

Dados dois operadores \hat{A} e \hat{B} que comutam entre si:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

Sempre existe uma base de autoestados $\{|\psi\rangle\}$ comum tanto para \hat{A} quanto para \hat{B} .

Demonstração. Seja $\{|\psi\rangle\}$ uma base de autoestados de $\hat{\mathcal{A}}$ sem autovalores degenerados, isto é,

$$\hat{\mathcal{A}}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$$

Como $\hat{\mathcal{A}}$ e $\hat{\mathcal{B}}$ comutam, podemos escrever

$$\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} = \hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}}$$

Podemos escrever portanto

$$\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}}|\psi\rangle = \hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}}|\psi\rangle = \hat{\mathcal{B}}(a|\psi\rangle) = a\hat{\mathcal{B}}|\psi\rangle$$

$$\hat{\mathcal{A}}(\hat{\mathcal{B}}|\psi\rangle) = a(\hat{\mathcal{B}}|\psi\rangle)$$

ou seja, $\hat{\mathcal{B}}|\psi\rangle$ é um autoestado de $\hat{\mathcal{A}}$ associado ao mesmo autovalor a . Isso significa que, dado que a não é degenerado, $\hat{\mathcal{B}}|\psi\rangle$ deve ser o mesmo autoestado que $|\psi\rangle$, o que só pode ocorrer se um for o outro a menos de uma constante b :

$$\hat{\mathcal{B}}|\psi\rangle = b|\psi\rangle$$

o que constitui uma equação de autovalores, concluindo nossa demonstração. ■

1.4 Operadores de posição e momento

Levando em conta que o conceito de posição e momento são quantidades claramente mensuráveis, de modo que se relacionam diretamente a observáveis, podemos atribuir a eles *operadores hermitianos*, tal que cada um terá seu próprio conjunto de autoestados e autovalores relacionados e, pelo Corolário 1.1, esses autoestados irão constituir uma base ortonormal.

1.4.1 O operador de posição

Denotemos o operador de posição por \hat{x} , em que ele é hermitiano e seus autoestados e autovalores satisfazem a equação:

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \quad (1.20)$$

É importante salientar que a base de autoestados é contínua, ou seja, cada elemento desta é contínuo, de modo que se usarmos a definição de posição da mecânica clássica, podemos nos locomover uma distância tão pequena quanto se queira que ainda estaremos no mesmo espaço, portanto

as equações passarão do discreto para o contínuo:

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |a_i\rangle \rightarrow |\psi\rangle = \int \psi(x') |x'\rangle dx'$$

$$\psi_i = \langle a_i | \psi \rangle \rightarrow \psi(x) = \langle x | \psi \rangle$$

$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij} \rightarrow \langle x' | x'' \rangle = \delta(x' - x'')$$

Podemos demonstrar a segunda equação de forma simples:

$$\begin{aligned} \langle x | \psi \rangle &= \langle x | \int \psi(x') |x'\rangle dx' \\ &= \int \psi(x') \langle x | x' \rangle dx' \\ &= \int \psi(x') \delta(x - x') dx' = \psi(x) \end{aligned}$$

Mesmo sendo uma demonstração simples, note a relevância deste resultado. Essencialmente o que estamos dizendo é que a função de onda $\psi(x)$ representa a projeção de um estado $|\psi\rangle$ qualquer no estado $|x\rangle$. Isto nos permite tratar muitas situações, como veremos mais adiante, com mais simplicidade e clareza, tendo em mente que nem sempre é fácil lidar com as funções de onda de forma direta.

Além disto, conseguimos tirar como consequência que $|\psi(x)|^2 dx$ se relaciona diretamente com a probabilidade de encontrar o estado $|\psi\rangle$ na posição x . Isso devido ao fato de que se o vetor de estado estiver normalizado:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle = 1 &= \int \psi^*(x') \langle x' | dx' \int \psi(x'') |x''\rangle dx'' \\ &= \int \int \psi^*(x') \psi(x'') \langle x' | x'' \rangle dx' dx'' \\ &= \int \int \psi^*(x') \psi(x'') \delta(x' - x'') dx' dx'' \\ &= \int \psi^*(x') \psi(x') dx' \\ &= \int |\psi(x')|^2 dx' \end{aligned}$$

Logo, se $\langle \psi | \mapsto \langle x |$, temos a probabilidade de encontrar o estado $|\psi\rangle$ na posição x .

1.4.2 O operador de momento

1.4.3 O comutador posição–momento

1.5 Mudança de base de representação

1.6 Evolução temporal



1.6.1 Descrição de Schrödinger

1.6.2 Descrição de Heisenberg

1.7 Relação de incerteza entre energia–tempo

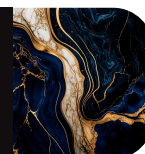


Leitura complementar

Exercícios



Aplicações dos conceitos básicos



2.1 Experimento de Stern–Gerlach

2.1.1 Operadores de dipolo magnético

2.2 Detecção de neutrinos

2.2.1 Experimento de Reines–Cowan (1953)

2.2.2 Experimento de Homestake (1953)

2.2.3 Super–K e SNO (2001)

2.2.4 Mundo simplificado: 2 tipos de neutrinos

2.3 O oscilador harmônico

2.3.1 Oscilador harmônico clássico

2.3.2 Oscilador harmônico quântico

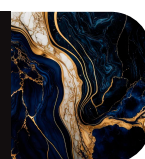
2.3.3 A função de onda



Leitura complementar

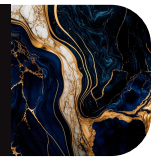
Exercícios

PARTE II



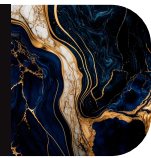
FUNDAMENTOS INTERMEDIÁRIOS

Mecânica Quântica em 3D



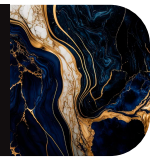


Sistemas de partículas idênticas





Teoria de perturbação



5.1 Independente do tempo

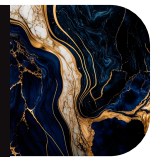


5.2 Dependente do tempo



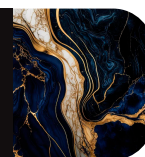


PARTE III



FUNDAMENTOS AVANÇADOS

Mecânica quântica relativística



Ao passarmos por diversas partes da mecânica quântica, podemos finalmente tratar de uma das partes mais interessantes a ser estudada e que gera uma diversidade de descrições mais avançadas, como por exemplo a Teoria Quântica de Campos. Nesta capítulo, trataremos inicialmente de uma básica revisão dos conceitos de relatividade *restrita*, seguida de uma dedução minuciosa da famosa equação de equação de Klein¹–Fock²–Gordon³ para bósons relativísticos e em seguida, um desenvolvimento apropriado para descrição de férmions relativísticos, através da também famosa equação de Dirac⁴.

A relatividade restrita, desenvolvida em seus primórdios por Einstein (1905), é parte de um dos tópicos mais importantes da física, juntamente com a relatividade geral. Em essência, a relatividade restrita descreve a estrutura básica do espaço-tempo (onde o tempo e o espaço são equivalentes), tal que a teoria não depende da escolha de nenhum referencial *inercial*, em que este fato se resume na chamadas *transformações de Lorentz*⁵, no entanto, a mecânica quântica *não*-relativística possui limitações que fazem com que tais requisitos não sejam satisfeitos. Um exemplo simples disso é o fato de que o tempo e o espaço são assimétricos, o que podemos ver na própria equação de Schrödinger, em que a derivada no tempo é de primeira ordem e a derivada no espaço é de segunda ordem.

A conciliação total entre a mecânica quântica e a relatividade restrita é a chamada “teoria quântica de de campos”, ou simplesmente TQC, no entanto, este tópico exige uma maturidade física e matemática muito superior ao que de fato abordamos até agora, o que nos leva a querer abordar o assunto de

¹Oskar Benjamin Klein (1894–1977).

²Vladimir Aleksandrovich Fock (1898–1974).

³Walter Gordon (1893–1939).

⁴Paul Adrien Maurice Dirac (1902–1984).

⁵Hendrik Antoon Lorentz (1853–1928).

uma forma menos radical, ou seja, a partir de mudanças sutis encontrar novas equações onde o espaço e o tempo sejam tratados de forma mais equilibrada. A construção destas novas equações acabam tendo consequências cruciais na teoria, como por exemplo o caso de antipartículas e a relação do spin com o momento magnético.

No entanto, antes de realmente tratarmos da parte relativística, é conveniente tratar os sistemas estudados em sistemas de unidades diferentes do SI. Isto não é feito por uma necessidade, mas sim pela utilidade, pois na prática, o desenvolvimento teórico se simplifica de forma imensurável ao tratá-lo com um sistema de unidades diferente.

6.1 Sistemas de unidades naturais

Em suma, podemos descrever as unidades naturais como uma representação numérica de grandezas, ou seja, este sistema vai estabelecer que as constantes físicas universais serão unitárias, adimensionais e independentes da escala humana, o que não é verdade para os sistemas de unidades SI, CGS, etc. Vale salientar que estamos tratando de *sistemas*, ou seja, não existe apenas um único sistema de unidades naturais, de modo que cada um é utilizado dependendo do contexto físico em que se está trabalhando para simplificar as contas e conseguir absorver melhor como a teoria está de fato sendo desenvolvida.

Escolheremos em particular um sistema introduzido por Planck (1900d) e modificadas por Sorkin (1983) através de uma normalização diferente, onde temos o que foi nomeada como “sistema de unidades naturais de Planck racionalizada” (ou para fins de praticidade, SN), caracterizada por:

$$\hbar = c = k_B = \varepsilon_0 = 4\pi G = 1$$

Neste sistema, a única unidade que de fato precisamos e utilizamos é o elétron-volt (eV), de modo que grande parte das unidades, como por exemplo a temperatura, serão expressas em unidades de energia. Com base nisto, as coisas se simplificam bastante, alguns exemplos disso são: a equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\psi) = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \Rightarrow -\frac{1}{2m}\nabla^2\psi + V(\psi) = i\frac{\partial\psi}{\partial t},$$

a relação entre massa e energia

$$E^2 = m^2c^4 + p^2c^2 \Rightarrow E^2 = m^2 + p^2$$

e até mesmo o princípio da incerteza

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}$$

Além de ver como funcionam as equações neste sistema, é conveniente e importante determinar como são as unidades nele, o que não é muito complicado de se ver. Através da relação entre massa e energia, tem-se que como $[E] = \text{eV}$:

$$E^2 = m^2 + p^2 \Rightarrow [E]^2 = [m]^2 + [p]^2 \Rightarrow [E] = [m] = [p] = \text{eV}$$

De forma similar, para determinar a unidade de comprimento, pode-se utilizar o princípio da incerteza:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} \Rightarrow [x][p] = \text{qtd. adimensional} \Rightarrow [x] = [p]^{-1} = \text{eV}^{-1}$$

e através do princípio da incerteza entre energia e tempo, tem-se

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{1}{2} \Rightarrow [E][t] = \text{qtd. adimensional} \Rightarrow [t] = [E]^{-1} = \text{eV}^{-1}$$

ou seja, tempo e espaço têm a mesma dimensão! Tendo em mente que nesse sistema de unidades $c = 1$ é uma quantidade adimensional, toda e qualquer velocidade também será adimensional e em particular teremos

$$0 \leq v \leq 1$$

Por fim, é conveniente também determinar a dimensão da carga elétrica, tendo em mente que em mecânica quântica esta quantidade se faz sempre presente, e para isso, partimos da constante de estrutura fina, que é uma quantidade adimensional:

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \Rightarrow \alpha = \frac{e^2}{4\pi} \Rightarrow e = \sqrt{4\pi\alpha} \approx 0.303 \text{ (qtd. adimensional)}$$

implicando que no SN a carga elétrica é também uma quantidade adimensional. Nota-se claramente que coisas são simplificadas teoricamente, pois as constantes que eventualmente aparecem são sempre iguais a 1 e adimensionais, tornando a matemática mais simples de ser trabalhada, no entanto, há a necessidade de saber converter as unidades do SN para o SI, por exemplo, o que não é difícil de ser feito.

Exemplo 6.1:

Se quisermos determinar o fator de conversão do tempo entre o SN e o SI, podemos fazer uso da constante de Planck reduzida:

$$\hbar = 1 = 0.658 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s} \Rightarrow 1 \text{ eV}^{-1} = 0.658 \cdot 10^{-15} \text{ s}$$

Exemplo 6.2:

De forma análoga ao exemplo anterior, podemos determinar o fator de conversão da posição entre os dois sistemas:

$$\hbar c = 1 = 0.658 \cdot 10^{-15} \cdot 2.998 \cdot 10^8 \text{ eV} \cdot \text{m} = 1.972 \cdot 10^{-7} \text{ eV} \cdot \text{m}$$

implicando portanto em

$$1 \text{ eV}^{-1} = 1.972 \cdot 10^{-7} \text{ m}$$

Exemplo 6.3:

Um exemplo prático de como as contas se simplificam pode ser visto a partir da determinação do estado fundamental do átomo de hidrogênio, isto por que a expressão para determinar as energias fica bem mais simples

$$E_n = -\left(\frac{\mathcal{Z}e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{m_e}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \Rightarrow E_n = -\left(\frac{\mathcal{Z}e^2}{4\pi}\right)^2 \frac{m_e}{2n^2} \stackrel{\mathcal{Z}=1}{=} -\frac{e^4 m_e}{32\pi^2 n^2}$$

Segue que para o estado fundamental ($n = 1$), utilizamos a massa do elétron (0.511 MeV) e o valor da carga elétrica (0.303) para obter

$$E_1 = -\frac{(0.303)^4 \cdot 0.511 \cdot 10^6}{32\pi^2} = -13.6 \text{ eV}$$

A partir deste ponto, usaremos em sua grande maioria este sistema de unidades naturais afim de simplificar as equações e suas interpretações.

6.2 Recordando relatividade restrita

A relatividade restrita é um conceito da física que pode ser compactada em dois postulados principais

- As leis da física são invariantes em relação a mudanças entre referenciais inerciais;
- A velocidade da luz independe da velocidade da fonte de luz.

O conteúdo destes postulados gera algumas consequências fundamentais para toda teoria, algumas delas são: o espaço e o tempo não são absolutos, o espaço pode ser contraído e o tempo dilatado, a simultaneidade de eventos é diferente dependendo do referencial, etc. E para entender melhor sobre esses postulados e suas consequências, é necessário relembrar sobre as transformações de Lorentz.

6.2.1 Transformações de Lorentz

Consideremos dois referenciais S e S' tais que S' se move em relação à S com velocidade $v = v_z = \beta$, onde $\beta := \frac{v}{c}$, mas como $c = 1$ no sistema de unidades naturais, temos apenas $\beta = v$. Lembrando que o fator de Lorentz é definido por

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}$$

temos que as transformações de Lorentz para este caso são

$$t' = \gamma(t - \beta z) \quad x' = x \quad y' = y \quad z' = \gamma(z - \beta t)$$

Com estas equações, podemos construir uma matriz que será responsável por armazenar todas as quantidades relacionadas às contrações espaciais e dilatações temporais:

$$\begin{pmatrix} t' \\ x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & -\beta\gamma \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\beta\gamma & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (6.1)$$

de modo que a partir desta construção, definimos um quadrivetor contravariante na forma

$$x^\mu := (x^0, x^1, x^2, x^3) \equiv (t, x, y, z) = (x^0, \mathbf{r})$$

e a matriz na verdade é a forma matricial do tensor de Lorentz, o que escrevemos nesta situação por

$$(\Lambda^\mu{}_\nu) := \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & -\beta\gamma \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\beta\gamma & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix}$$

Com estas duas definições, podemos reescrever a equação (6.1) em termos do quadrivetor e do tensor de Lorentz:

$$x'^\mu = \sum_{\nu=0}^3 \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu$$

o que ainda pode ser simplificado ao utilizar-se a notação de Einstein, que nos diz que se houver os mesmos índices covariantes e contravariantes, a somatória é subentendida na conta, ou seja

$$x'^\mu = \sum_{\nu=0}^3 \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu$$

Como nas transformações de Galileu, que nos diz que valores espaciais não mudam de tamanho com mudanças de referencial, os quadrivetores não mudam de tamanho por transformações de Lorentz. Definimos o produto escalar entre dois quadrivetores x^μ e y^μ por

$$A := x^0 y^0 - \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = x^0 y^0 - x^1 y^1 - x^2 y^2 - x^3 y^3 \quad (6.2)$$

Desta forma, o “tamanho” de um quadrivetor é determinado simplesmente por

$$A = x^0 x^0 - \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}$$

Com estas relações em mente, podemos mudar de referencial através das transformações de Lorentz e verificar se os quadrivetores são mesmo invariantes por transformações de Lorentz.

$$\begin{aligned} A' &= x'^0 x'^0 - \mathbf{x}' \cdot \mathbf{x}' \\ &= \gamma(t - \beta z)\gamma(t - \beta z) - x^2 - y^2 - \gamma(z - \beta t)\gamma(z - \beta t) \\ &= \gamma^2(t^2 - 2\beta tz + \beta^2 z^2) - x^2 - y^2 - \gamma^2(z^2 - 2\beta tz + \beta^2 t^2) \\ &= \frac{1}{1 - \beta^2}(t^2 - 2\beta tz + \beta^2 z^2 - z^2 + 2\beta tz - \beta^2 t^2) - x^2 - y^2 \\ &= \frac{1}{1 - \beta^2}(t^2 - \beta^2 t^2 - z^2 + \beta^2 z^2) - x^2 - y^2 \\ &= \frac{1}{1 - \beta^2}[(1 - \beta^2)t^2 - (1 - \beta^2)z^2] - x^2 - y^2 \\ &= t^2 - x^2 - y^2 - z^2 \\ &= x^0 x^0 - \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} = A \end{aligned}$$

concluindo o que queríamos mostrar. Agora analisando a expressão para o produto escalar, somos influenciados a olhar para o sinal negativo presente em (6.2) e pensar que de alguma forma, podemos definir outro quadrivetor para mudar este sinal, o que será chamado de quadrivetor covariante, definido por

$$x_\mu := (x_0, -x_1, -x_2, -x_3) \equiv (t, -x, -y, -z) = (x_0, -\mathbf{r})$$

de tal forma que o produto escalar entre 2 quadrivetores possa ser escrito como

$$\begin{aligned} x^\mu y_\mu &= \sum_{\mu=0}^3 x^\mu y_\mu = x^0 y_0 + x^1 y_1 + x^2 y_2 + x^3 y_3 \\ &= x^0 y^0 - x^1 y^1 - x^2 y^2 - x^3 y^3 \end{aligned}$$

Tendo então as formas covariante e contravariante em mãos, precisamos de uma forma de escrever uma em relação a outra, e para isso utilizamos o

tensor métrico de Minkowski⁶ dado por

$$(g_{\mu\nu}) := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = (g^{\mu\nu}) \quad (6.3)$$

► Em muitos livros, infelizmente, utiliza-se uma outra convenção para o tensor métrico, que ao invés de possuir $\text{diag}(g_{\mu\nu}) = (+ - - -)$, inverte os sinais para ficar com $\text{diag}(g_{\mu\nu}) = (- + + +)$, porém esta convenção tende a ser problemática em relação a algumas interpretações, o que não é muito conveniente.

Utilizando então este tensor métrico, podemos passar da notação covariante para a contravariante (e vice-versa) através das relações

$$x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu \quad \& \quad x^\mu = g^{\mu\nu} x_\nu$$

e com isso, podemos escrever o produto escalar entre 2 quadrivetores por

$$A = x^\mu g_{\mu\nu} y^\nu = x_\mu g^{\mu\nu} y_\nu$$

Uma outra propriedade importante relativa ao tensor métrico é o fato de que como $g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu}$, temos que

$$g_{\mu\nu} g^{\nu\rho} = \mathbb{1} = \delta_\mu^\rho$$

Através de tais conversões e propriedades, somos capazes agora de encontrar relações entre as velocidades. Consideremos uma partícula de massa m se movendo com velocidade v em um referencial, de tal forma que as coordenadas desta partícula neste referencial assumem a forma

$$d\mathbf{r} = v dt,$$

tal que o quadrivetor (dt, dx, dy, dz) se transformam com as transformações de Lorentz e portanto seu comprimento é invariante sob elas, isto é

$$dx^\mu = (dt, d\mathbf{r})$$

é invariante e a quantidade

$$\begin{aligned} d\tau^2 &= dx^\mu dx_\mu = dt^2 - d\mathbf{r}^2 \\ &= dt^2 - v^2 dt^2 \\ &= (1 - v^2) dt^2 \\ &= \frac{1}{\gamma^2} dt^2 \end{aligned}$$

⁶Hermann Minkowski (1864–1909).

é também invariante. O tempo τ , definido na forma $d\tau^2 = dt^2(1 - v^2)$ é denominado de “tempo próprio”. Então se dx^μ e $d\tau$ são invariantes, o quadrivetor construído por

$$u^\mu := \frac{dx^\mu}{d\tau} = \left(\gamma \frac{dt}{dt}, \gamma \frac{dx}{dt}, \gamma \frac{dy}{dt}, \gamma \frac{dz}{dt} \right)$$

é também invariante e é denominado “quadrivetor velocidade”, que comumente é escrito na forma

$$u^\mu = (\gamma, \gamma \mathbf{v})$$

Com esta forma, temos

$$u^\mu u_\mu = \gamma^2 - (\gamma \mathbf{v}) \cdot (\gamma \mathbf{v}) = \gamma^2 - \gamma^2 v^2 = \gamma^2(1 - v^2) = \frac{\gamma^2}{\gamma^2} = 1$$

o que fora do sistema de unidades naturais seria $u^\mu u_\mu = c^2$. Dado então que u^μ é o quadrivetor velocidade e é invariante, o quadrivetor mu^μ também será invariante, pois a massa se mantém invariante, de modo que defini-se o quadrivetor momento por

$$p^\mu := (\gamma m, \gamma m \mathbf{v}) \equiv (E, \mathbf{p})$$

quer é de fato invariante por construção, além de que

$$p^\mu p_\mu = (\gamma m)(\gamma m) - (\gamma m \mathbf{v}) \cdot (\gamma m \mathbf{v}) = \gamma^2 m^2 - \gamma^2 m^2 v^2 = m^2 \gamma^2(1 - v^2) = m^2$$

Este último desenvolvimento nos dá uma importante relação a ser salientada e enfatizada, que é chamada de relação de dispersão entre energia e momento

$$p^\mu p_\mu = E^2 - p^2 = m^2 \quad (6.4)$$

Além dos quadrivetores posição, velocidade, momento, etc, podemos extrapolar a notação quadrivetorial para derivadas parciais, isto é, ao escrevermos

$$\partial^\mu := \frac{\partial}{\partial x_\mu} \equiv \left(\frac{\partial}{\partial t}, -\nabla \right) \quad \& \quad \partial_\mu := \frac{\partial}{\partial x^\mu} \equiv \left(\frac{\partial}{\partial t}, \nabla \right)$$

de modo que ∂^μ se comporta como um quadrivetor contravariante, mesmo que utilizemos em $\frac{\partial}{\partial x_\mu}$ uma notação covariante no “denominador”. De forma similar o contrário vai ocorrer com ∂_μ , que se comporta como um quadrivetor covariante, mas se escreve por $\frac{\partial}{\partial x^\mu}$. Com essas notações, temos

$$\begin{aligned} \partial_\mu \partial^\mu &= \frac{\partial}{\partial x^0} \frac{\partial}{\partial x_0} - \frac{\partial}{\partial x^1} \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\partial}{\partial x^2} \frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{\partial}{\partial x^3} \frac{\partial}{\partial x_3} \\ &= \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \end{aligned}$$

O operador $\partial_\mu \partial^\mu$ é chamado “operador D’alambertiano”.

- Em muitos livros, podem-se encontrar diferentes notações para este operador, uma das mais comuns é representá-lo por \square ou \square^2 , que possui um sentido por trás, que é o fato de que por estarmos numa representação quadridimensional, o quadrado seria um análogo ao ∇^2 , que trata das derivadas em 3 dimensões, ou seja, como o quadrado tem 4 lados, seria uma boa ideia representar uma derivada em 4 dimensões com ele, já que o laplaciano é em 3 dimensões e é representado por um triângulo. Da mesma forma, representar \square ou \square^2 varia de gosto pra gosto, pois a primeira forma é simples e contém as informações necessárias, já a segunda forma, faz questão de enfatizar que as derivadas dentro do D’alembertiano são de segunda ordem, e por isso são elevadas ao quadrado. Uma última maneira de representar este operador, utilizada bastante em TQC, é a forma ∂^2 , que leva em conta simplesmente o fato de que $\partial_\mu \partial^\mu$ é como um produto de dois objetos “iguais”.

6.3 A equação de Klein–Fock–Gordon

Ao tratarmos de mecânica quântica não-relativística, conseguimos obter uma equação de onda, que é a equação de Schrödinger, no entanto esta equação não é válida ao considerarmos situações onde as partículas possuem caráter relativísticos. Sendo assim, como podemos obter uma equação de onda relativística no ponto de vista da mecânica quântica? Para responder essa pergunta, podemos utilizar os operadores de momento e energia, e considerarmos uma onda plana, dada por

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)}, \text{ onde } \begin{cases} \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar} = \mathbf{p} \text{ (no SN)} \\ \omega = \frac{E}{\hbar} = E \text{ (no SN)} \end{cases}$$

Vemos então que, em uma onda plana, os operadores de momento e energia são facilmente observados. Se utilizarmos que $\hat{p} = -i\nabla$ e aplicarmos a $\psi(\mathbf{r}, t)$, temos que

$$\begin{aligned} -i\nabla\psi(\mathbf{r}, t) &= -i(i\mathbf{p})e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)} \\ &= \mathbf{p}e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)} \end{aligned}$$

implicando que podemos de fato utilizar a forma usual do operador \hat{p} da mecânica quântica neste caso. No caso do operador de energia, se utilizarmos que $\hat{\mathcal{H}} = i\frac{\partial}{\partial t}$ e aplicarmos na onda plana, obtemos

$$\begin{aligned} i\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= i(-iE)e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)} \\ &= Ee^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)} \end{aligned}$$

de modo que a forma usual do operador de energia da mecânica quântica também se aplica aqui. Recorrendo então à relação de dispersão entre energia e momento, eq. (6.4), podemos fazer a mudança

$$\begin{aligned} E &\mapsto i\frac{\partial}{\partial t} \Rightarrow E^2 = -\frac{\partial^2}{\partial t^2} \\ \mathbf{p} &\mapsto -i\nabla \Rightarrow p^2 = \nabla^2 \end{aligned}$$

e através da (6.4) obtemos

$$E^2 - p^2 = m^2 \Rightarrow -\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \nabla^2 = m^2$$

onde aqui o que obtemos o operador D'alembertiano, cujo autovalor é $-m^2$ (o sinal negativo vem por conta de que a equação acima possui os sinais trocados ao do operador). Sendo assim, ao aplicarmos este operador à onda plana, obtemos a famigerada equação de Klein (1926)–Fock (1926)–Gordon (1926)

$$\frac{\partial^2 \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} - \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) = -m^2 \psi(\mathbf{r}, t) \quad (6.5)$$

que utilizando uma notação mais interessante se reescreve na forma

$$(\partial_\mu \partial^\mu + m^2) \psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (6.6)$$

Em mecânica quântica não-relativística, temos a densidade de probabilidade ρ sendo dada por $\rho = \psi^* \psi = |\psi|^2$. Se buscarmos por uma equação de continuidade, precisamos de uma quantidade \mathbf{J} sendo uma densidade de corrente associada em que pode ser obtida através da equação de Schrödinger.

Partindo então da equação de Schrödinger, temos uma equação para $\psi(\mathbf{r}, t) \equiv \psi$ e uma análoga para $\psi^*(\mathbf{r}, t) \equiv \psi^*$. Temos então:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad \& \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi^* = -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t}$$

Explicitando $\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla$, fica mais fácil ver quando a equação da continuidade aparecer. As equações ficam então:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot \nabla \psi + V(\mathbf{r}) \psi &= i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot \nabla \psi^* + V(\mathbf{r}) \psi^* &= -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \end{aligned}$$

Multiplicando a equação de cima por ψ^* pela esquerda, e multiplicando por ψ na equação de baixo pela direita:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot [\psi^* (\nabla \psi)] + V(\mathbf{r}) \psi^* \psi &= i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\nabla \psi^*) \psi + V(\mathbf{r}) \psi^* \psi &= -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \end{aligned}$$

Dividindo ambas por $-i\hbar$:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot [\psi^* (\nabla \psi)] - \frac{1}{i\hbar} V(\mathbf{r}) \psi^* \psi &= -\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \\ \frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot (\nabla \psi^*) \psi - \frac{1}{i\hbar} V(\mathbf{r}) \psi^* \psi &= \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \end{aligned}$$

Subtraindo a da esquerda pela da direita, os termos com potencial se cancelam e obtemos:

$$\nabla \cdot \left\{ \frac{\hbar}{2mi} [(\nabla \psi^*) \psi - \psi^* (\nabla \psi)] \right\} = \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

É fácil ver que:

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial (\psi^* \psi)}{\partial t}$$

Portanto, podemos escrever uma equação de continuidade para $\psi^* \psi$:

$$\frac{\partial (\psi^* \psi)}{\partial t} + \nabla \cdot \left\{ \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* (\nabla \psi) - (\nabla \psi^*) \psi] \right\} = 0$$

Em que a densidade de corrente associada \mathbf{J} é definida por

$$\mathbf{J} := \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* (\nabla \psi) - (\nabla \psi^*) \psi] \quad (6.7)$$

ou seja, podemos escrever em mecânica quântica não-relativística que

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (6.8)$$

A pergunta que surge após este desenvolvimento, dado que partimos da equação de Schrödinger, é se $\rho \stackrel{?}{=} |\psi|^2$ se mantém ao partirmos da equação de Klein–Fock–Gordon para encontrar uma equação de continuidade.

Pela equação de Klein–Fock–Gordon, temos duas formas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} - \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) &= -m^2 \psi(\mathbf{r}, t) \\ \frac{\partial^2 \psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} - \nabla^2 \psi^*(\mathbf{r}, t) &= -m^2 \psi^*(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

Multiplicando a primeira equação por $-i\psi^*$ e a de baixo por $i\psi$, ficamos com

$$\begin{aligned} i\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}\psi^* - i(\nabla^2\psi)\psi^* &= -im^2|\psi|^2 \\ -i\frac{\partial^2\psi^*}{\partial t^2}\psi + i(\nabla^2\psi^*)\psi &= im^2|\psi|^2 \end{aligned}$$

Somando as duas,

$$i\left[\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}\psi^* - \frac{\partial^2\psi^*}{\partial t^2}\psi\right] - i\left[(\nabla^2\psi)\psi^* - (\nabla^2\psi^*)\psi\right] = 0 \quad (6.9)$$

Note que o primeiro termo da equação pode ser representado de uma forma mais interessante, de modo que ao somarmos e subtrairmos a quantidade

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\partial\psi}{\partial t}\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$$

teremos

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}\psi^* - \frac{\partial^2\psi^*}{\partial t^2}\psi &= \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}\psi^* + \frac{\partial\psi}{\partial t}\frac{\partial\psi^*}{\partial t} - \frac{\partial^2\psi^*}{\partial t^2}\psi - \frac{\partial\psi}{\partial t}\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \\ &= \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^* - \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right) \end{aligned} \quad (6.10)$$

e de forma similar, podemos somar e subtrair no segundo termo a quantidade

$$\nabla\psi^* \cdot \nabla\psi = \nabla\psi \cdot \nabla\psi^*$$

ficamos com

$$\begin{aligned} (\nabla^2\psi)\psi^* - (\nabla^2\psi^*)\psi &= (\nabla^2\psi)\psi^* + \nabla\psi \cdot \nabla\psi^* - (\nabla^2\psi^*)\psi - \nabla\psi^* \cdot \nabla\psi \\ &= \nabla \cdot [(\nabla\psi)\psi^* - (\nabla\psi^*)\psi] \end{aligned} \quad (6.11)$$

Então ao substituírmos (6.10) e (6.11) na equação (6.9) chegamos na equação

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[i\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^* - \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right)\right] + \nabla \cdot \{-i[(\nabla\psi)\psi^* - (\nabla\psi^*)\psi]\} = 0$$

que se uma equação de continuidade ao considerarmos que

$$\rho := i\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^* - \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right) \quad \& \quad \mathbf{J} := -i[(\nabla\psi)\psi^* - (\nabla\psi^*)\psi]$$

ou seja, a densidade de probabilidade ρ não é mais $|\psi|^2$ como no caso anterior.

Uma forma mais elegante de se escrever esta equação de continuidade é a partir do quadrivetor fluxo, construído na forma $j^\mu = (\rho, \mathbf{J})$ e definido por

$$j^\mu = i[(\partial^\mu\psi)\psi^* - (\partial^\mu\psi^*)\psi]$$

de tal forma que a equação de continuidade fica

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \quad (6.12)$$

Mas o que significa $\rho \neq |\psi|^2$? Qual o impacto dese resultado? O fato de $\rho = i\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^* - \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right)$ faz com que esse valor passa, inclusive, assumir valores negativos. Dessa forma, a grandeza não pode ser interpretada com uma densidade de probabilidade e a quantidade

$$P = \int \rho \, d\mathbf{r} = \text{constante}$$

também não pode ser interpretada como uma probabilidade. Mas por quê não podemos fazer este tipo de interpretação? Como, então, interpretaremos tais grandezas? Para responder isso, tomemos um caso simples de uma partícula livre descrita por uma onda plana da forma $\psi = Ne^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)}$. A partir das definições de ρ e \mathbf{J} , temos para este caso que

$$\begin{aligned} \rho &= i\left[(-iE)|N|^2 - iE|N|^2\right] = 2E|N|^2 \\ \mathbf{J} &= -i\left[(i\mathbf{p})|N|^2 + i\mathbf{p}|N|^2\right] = 2\mathbf{p}|N|^2 \end{aligned}$$

Mas pela relação de dispersão (6.4) temos que

$$E^2 = m^2 + p^2 \Rightarrow E = \pm\sqrt{m^2 + p^2}$$

implicando na possibilidade de $E < 0$ e portanto possibilitando que ρ possa ser negativo. Com isso em mente, se energias positivas e negativas são soluções da equação de Klein–Fock–Gordon, logo, a combinação linear delas também é solução. Logo, uma forma mais geral de escrever ψ é através da forma

$$\psi = N\left[ae^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-|E|t)} + be^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}+|E|t)}\right]$$

com a primeira parte sendo relativa à energias $E > 0$, a segunda para $E < 0$ e os fatores a e b são constantes de normalização. Com esta forma e através da definição de ρ , obtemos agora

$$\rho = 2|E||N|^2(|a|^2 - |b|^2) \quad (6.13)$$

Isso indica que a equação de Klein–Fock–Gordon não trata da solução para uma única partícula, mas sim para uma par de partículas, uma com $E > 0$ e outra com $E < 0$, cada uma com uma amplitude de probabilidade que depende de $|a|^2$ e $|b|^2$. Apesar deste resultado ser muito interessante, alguns problemas surgem em relação a $E < 0$ e $\rho < 0$. O primeiro é o fato de que para $E < 0$, ocorrem transições espontâneas e infinitos estados, em segundo lugar qual é o significado de $\rho < 0$? Pergunta esta que só foi respondida por Dirac (1958).

6.4 A equação de Dirac

O fato da equação de Klein–Fock–Gordon ser de segunda ordem no tempo faz com que ρ possa assumir valores negativos, como vimos anteriormente. Ao estudar sobre a teoria relativística dos elétrons, Dirac não ficou satisfeito com esta possibilidade, mesmo que houvessem “remendos” interpretativos em relação ao significado de $\rho < 0$. Além disso, a equação de Klein–Fock–Gordon não explica a existência do spin do elétron.

Afim de tentar solucionar estes problemas, Dirac buscou obter uma equação relativística de primeira ordem no tempo que incluísse soluções para diferentes spins do elétron. O que ele buscava era uma equação que satisfizesse as transformações de Lorentz, ou seja, se a equação é de primeira ordem no tempo, então ela também deve ser de primeira ordem no espaço, pois apenas assim as transformações serão satisfeitas.

Para encontrar tal equação, Dirac postulou uma hamiltoniana que fosse linear nas derivadas espaciais, mas que mantivesse a hermiticidade que a própria equação de Schrödinger possui. Esta equação é dada por

$$\hat{\mathcal{H}}\psi(\mathbf{r}, t) = \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \mathbf{p}\psi(\mathbf{r}, t) + \hat{\beta}m\psi(\mathbf{r}, t) \quad (6.14)$$

onde $\psi(\mathbf{r}, t)$ é um estado quântico, α e β operadores a serem determinados que devem ser ao mesmo tempo, independentes de (\mathbf{p}, t) por linearidade e independente de (\mathbf{r}, t) pela homogeneidade do espaço-tempo e \mathbf{p} denota o vetor momento em 3 dimensões espaciais. Além disso, os operadores a serem determinados são adimensionais e devemos respeitar a equação (6.4), tal que

$$\hat{\mathcal{H}}^2\psi(\mathbf{r}, t) = (p^2 + m^2)\psi(\mathbf{r}, t) \quad (6.15)$$

Podemos reescrever a equação (6.14) na forma

$$\hat{\mathcal{H}}\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^3 \hat{\alpha}_i p_i \psi(\mathbf{r}, t) + \hat{\beta}m\psi(\mathbf{r}, t)$$

de modo que ao fazer esta equação ao quadrado, temos a expansão

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}^2\psi(\mathbf{r}, t) &= \left[\sum_{i=1}^3 \hat{\alpha}_i^2 p_i^2 + \sum_{i=1}^3 (\hat{\alpha}_i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_i) p_i m + \right. \\ &\quad \left. \sum_{i=1}^3 \sum_{j \neq i} (\hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j + \hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_i) p_i p_j + \hat{\beta}^2 m^2 \right] \psi(\mathbf{r}, t) \\ \text{(deve ser)} &= (p^2 + m^2)\psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

Comparando então termo-a-termo, temos que

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^3 \hat{\alpha}_i^2 p_i^2 &\stackrel{!}{=} p^2 \Rightarrow \hat{\alpha}_i^2 = 1 \\ \sum_{i=1}^3 (\hat{\alpha}_i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_i) p_i m &\stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \hat{\alpha}_i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_i = \{\hat{\alpha}_i, \hat{\beta}\} = 0 \\ \sum_{i=1}^3 \sum_{j \neq i} (\hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j + \hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_i) p_i p_j &\stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j + \hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_i = \{\hat{\alpha}_i, \hat{\alpha}_j\} = 0 \\ \hat{\beta}^2 m^2 &\stackrel{!}{=} m^2 \Rightarrow \hat{\beta}^2 = 1\end{aligned}$$

e a partir destas equações/condições, é evidente que os operadores $\hat{\alpha}_i$ e $\hat{\beta}$ não podem ser números, mas sim **matrizes**. Matrizes estas que satisfazem relações de anti-comutação entre $\hat{\alpha}_1$, $\hat{\alpha}_2$, $\hat{\alpha}_3$ e $\hat{\beta}$, além de que

$$\hat{\alpha}_1^2 = \hat{\alpha}_2^2 = \hat{\alpha}_3^2 = \hat{\beta}^2 = \mathbb{1}$$

Para que tais condições sejam satisfeitas, os operadores $\hat{\alpha}_i$ e $\hat{\beta}$ devem ser matrizes hermitianas, de traço nulo e auto-valores ± 1 , cuja menor dimensão possível destas matrizes é 4, onde a demonstração deste último pode ser vista em detalhes em Schiff (1968). Para demonstrar as outras 3 propriedades, precisamos de uma representação para esses operadores e nestas notas, a representação que será utilizada é a representação de Dirac-Pauli, dada por

$$(\hat{\alpha}) = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma} \\ \hat{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad \& \quad (\hat{\beta}) = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_{2 \times 2} \end{pmatrix}$$

onde $\hat{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ são as matrizes de Pauli e $\mathbb{1}_{2 \times 2}$ a matriz identidade de dimensão 2.

Agora, sabendo que podemos representar os operadores $\hat{\mathcal{H}} \mapsto i \frac{\partial}{\partial t}$ e $\mathbf{p} = -i \nabla$, temos que a equação (6.14) se reescreve na forma

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -i \hat{\alpha} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, t) + \beta m \psi(\mathbf{r}, t)$$

Multiplicando ambos os lados por $\hat{\beta}$ à esquerda e usando o fato de que $\hat{\beta}^2 = \mathbb{1}$, temos

$$i \hat{\beta} \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -i \hat{\beta} \hat{\alpha} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, t) + \mathbb{1} m \psi(\mathbf{r}, t)$$

e portanto, sendo $\mathbb{1} m \mapsto m$ agora uma matriz com $\text{diag}(m) = (m, m, m, m)$,

$$\left(i \hat{\beta} \frac{\partial}{\partial t} + i \hat{\beta} \hat{\alpha} \cdot \nabla - m \right) \psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

Definindo então o quadrivetor

$$\gamma^\mu = (\hat{\beta}, \hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}})$$

onde γ^μ será um quadrivetor com seus elementos sendo matrizes de dimensão 4, denominadas “matrizes gamma”, podemos obter de fato a equação de Dirac em sua forma covariante:

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (6.16)$$

Ou, através da notação “slash” de Feynman, onde ele define para um quadrivetor A_μ a seguinte notação: $\not{A} := \gamma^\mu A_\mu$. Implicando em

$$(i\not{\partial} - m)\psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (6.17)$$

Note então que a única forma da equação de Dirac ser satisfeita é que $\psi(\mathbf{r}, t)$ seja um objeto de 4 componentes na forma

$$\psi(\mathbf{r}, t) \equiv \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \psi_2(\mathbf{r}, t) \\ \psi_3(\mathbf{r}, t) \\ \psi_4(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}$$

Com tais informações em mente, o que podemos aprender com essa equação? Uma primeira forma de responder essa pergunta é analisando a solução de um dos casos mais simples possível: partículas livres.

Para uma partícula livre, podemos escrever simplesmente que

$$\psi(\mathbf{r}, t) = u e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)} \quad (6.18)$$

porém, agora, $\psi(\mathbf{r}, t)$ é um objeto com 4 componentes, o que nos dá

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)}$$

onde u é um objeto de 4 componentes chamado **espinor**.

Tomando como base a equação (6.14) para facilitar a análise, temos

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= -i\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, t) + \hat{\beta} m \psi(\mathbf{r}, t) \\ i(-iE)\psi(\mathbf{r}, t) &= -i\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot (i\mathbf{p})\psi(\mathbf{r}, t) + \hat{\beta} m \psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

e portanto

$$Eu = (\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \mathbf{p} + \hat{\beta} m)u \quad (6.19)$$

Olhando então para soluções de partículas no limite não-relativístico, ou seja $p \ll m$, temos

$$Eu = \hat{\beta}mu = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{2 \times 2}m & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_{2 \times 2}m \end{pmatrix} u = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -m & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -m \end{pmatrix} u$$

É evidente então o fato de que temos 4 auto-valores de energia $E = +m, +m, -m, -m$ e conseqüentemente 4 auto-estados

$$u_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \& \quad u_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \& \quad u_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \& \quad u_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

onde associamos os 2 primeiros espinores u_1 e u_2 à energia $E = +m$, em que u_1 representa o espinor de uma partícula de energia $E = m$ com spin positivo e u_2 representa o espinor de uma partícula de energia $E = m$ com spin negativo. Analogamente, u_3 representa o espinor de uma partícula de energia $E = -m$ com spin positivo e u_4 o espinor de uma partícula de energia $E = -m$ com spin negativo.

Agora passando para o caso relativístico, onde $p \sim m$, temos através da equação (6.19) que

$$Eu = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{2 \times 2}m & \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p} \\ \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p} & -\mathbb{1}_{2 \times 2}m \end{pmatrix} u$$

Sendo então

$$u = \begin{pmatrix} u_p \\ u_d \end{pmatrix}$$

podemos determinar os valores dos estados u_p e u_d por

$$\begin{pmatrix} \mathbb{1}_{2 \times 2}E & 0 \\ 0 & \mathbb{1}_{2 \times 2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_p \\ u_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{2 \times 2}m & \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p} \\ \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p} & -\mathbb{1}_{2 \times 2}m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_p \\ u_d \end{pmatrix}$$

implicando em

$$\begin{cases} \mathbb{1}_{2 \times 2}(E - m)u_p - \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p}u_d = 0 \\ -\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p}u_p + \mathbb{1}_{2 \times 2}(E + m)u_d = 0 \end{cases}$$

A segunda equação nos dá que

$$u_d = \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p}}{E + m} u_p \quad (6.20)$$

Substituindo isto na primeira equação e usando o fato de que $(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p})^2 = p^2$, obtemos para u_p que

$$\mathbb{1}_{2 \times 2} [E^2 - (m^2 + p^2)] u_p = 0$$

onde as soluções possíveis são: o caso trivial de $u_p = 0$ e

$$E^2 - (m^2 + p^2) = 0 \Rightarrow E = \pm \sqrt{p^2 + m^2}$$

O que é condizente com o que obtivemos utilizando a equação de Klein-Fock-Gordon! Olhando particularmente para o caso em que $E > 0$ (onde o caso $E < 0$ é análogo), podemos escolher por conveniência

$$u_p = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad u_p = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

e utilizar a equação (6.20) para obter duas formas para u_d :

$$u_d = \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p}}{E + m} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad u_d = \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p}}{E + m} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

em que, como $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p} = \sigma_1 p_1 + \sigma_2 p_2 + \sigma_3 p_3$, temos explicitamente

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p} = \begin{pmatrix} p_3 & p_1 - ip_2 \\ p_1 + ip_2 & -p_3 \end{pmatrix}$$

Concluindo então que

$$u_d = \frac{1}{E + m} \begin{pmatrix} p_3 \\ p_1 + ip_2 \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad u_d = \frac{1}{E + m} \begin{pmatrix} p_1 - ip_2 \\ -p_3 \end{pmatrix}$$

ou seja, as soluções de u para $E > 0$ são

$$u = \frac{1}{E + m} \begin{pmatrix} E + m \\ 0 \\ p_3 \\ p_1 + ip_2 \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad u = \frac{1}{E + m} \begin{pmatrix} 0 \\ E + m \\ p_1 - ip_2 \\ -p_3 \end{pmatrix}$$

Lembrando então da equação (6.18), temos para $E > 0$ que os estados possíveis para partícula livre são

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)}}{E + m} \begin{pmatrix} E + m \\ 0 \\ p_3 \\ p_1 + ip_2 \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad \psi(\mathbf{r}, t) = \frac{e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)}}{E + m} \begin{pmatrix} 0 \\ E + m \\ p_1 - ip_2 \\ -p_3 \end{pmatrix}$$

No caso de $E < 0$, temos que

$$u = \frac{1}{E - m} \begin{pmatrix} p_3 \\ p_1 + ip_2 \\ E - m \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad u = \frac{1}{E - m} \begin{pmatrix} p_1 - ip_2 \\ -p_3 \\ 0 \\ E - m \end{pmatrix}$$

e portanto os possíveis estados possíveis para partícula livre são

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)}}{E - m} \begin{pmatrix} p_3 \\ p_1 + ip_2 \\ E - m \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad \psi(\mathbf{r}, t) = \frac{e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)}}{E - m} \begin{pmatrix} p_1 - ip_2 \\ -p_3 \\ 0 \\ E - m \end{pmatrix}$$

Para determinar a equação da continuidade através da equação de Klein-Fock-Gordon, tomamos o conjugado complexo das equações e desenvolvemos as contas. No caso da equação de Dirac, o fato de termos matrizes e vetores, nos leva a fazer algo análogo a tomar o conjugado complexo, ou seja, tomar os hermitianos conjugados!

A partir da definição das matrizes gamma e da construção dos operadores $\hat{\alpha}_i$ e $\hat{\beta}$, temos que

$$\gamma^0 = \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_{2 \times 2} \end{pmatrix} \Rightarrow (\gamma^0)^\dagger = \beta = \gamma^0 \quad (6.21)$$

$$\gamma^i = \hat{\beta} \hat{\alpha}_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow (\gamma^i)^\dagger = -\gamma^i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (6.22)$$

Tendo então estas equações, temos primeiro que a equação de Dirac expandida é

$$i\gamma^0 \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + i \sum_{k=1}^3 \gamma^k \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial x^k} - m\psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

e em segundo que a equação de Dirac conjugada é

$$-i \frac{\partial \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \gamma^0 - i \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)}{\partial t} (-\gamma^k) - m\psi^\dagger(\mathbf{r}, t) = 0$$

O sinal negativo em $(-\gamma^k)$ é inconveniente se compararmos as duas equações, de modo que para resolver isso, multiplicamos por γ^0 pela direita e usamos o fato de que $\gamma^k \gamma^0 = -\gamma^0 \gamma^k$, tal que ficamos com

$$-i \frac{\partial \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \gamma^0 \gamma^0 - i \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \gamma^0 \gamma^k - m\psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \gamma^0 = 0$$

Se definirmos $\bar{\psi}(\mathbf{r}, t) := \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \gamma^0$, obtemos

$$-i \frac{\partial \bar{\psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \gamma^0 - \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \bar{\psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial x^k} \gamma^k - m\bar{\psi}(\mathbf{r}, t) = 0$$

que pode ser escrita de forma mais compacta como

$$i\partial_\mu \bar{\psi}(\mathbf{r}, t) \gamma^\mu + m\bar{\psi}(\mathbf{r}, t) = 0$$

Multiplicando a equação de Dirac por $\bar{\psi}(\mathbf{r}, t)$ e esta última equação por $\psi(\mathbf{r}, t)$, temos, respectivamente

$$i\bar{\psi}(\mathbf{r}, t)\gamma^\mu\partial_\mu\psi(\mathbf{r}, t) - m\bar{\psi}(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

$$i\partial_\mu\bar{\psi}(\mathbf{r}, t)\gamma^\mu\psi(\mathbf{r}, t) + m\bar{\psi}(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

e somando ambas,

$$\bar{\psi}(\mathbf{r}, t)\gamma^\mu[\partial_\mu\psi(\mathbf{r}, t)] + [\partial_\mu\bar{\psi}(\mathbf{r}, t)]\gamma^\mu\psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

Se definirmos $j^\mu := \bar{\psi}(\mathbf{r}, t)\gamma^\mu\psi(\mathbf{r}, t)$, temos pela regra da cadeia que

$$\partial_\mu j^\mu = \bar{\psi}(\mathbf{r}, t)\gamma^\mu[\partial_\mu\psi(\mathbf{r}, t)] + [\partial_\mu\bar{\psi}(\mathbf{r}, t)]\gamma^\mu\psi(\mathbf{r}, t)$$

Ou seja, a equação acima é uma equação da continuidade

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \quad (6.23)$$

para $j^\mu := \bar{\psi}(\mathbf{r}, t)\gamma^\mu\psi(\mathbf{r}, t)$. Mas qual o impacto deste resultado? Tendo que $\rho = j^0$, temos também que

$$\begin{aligned} \rho &= \bar{\psi}(\mathbf{r}, t)\gamma^0\psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\underbrace{\gamma^0\gamma^0}_1\psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) \\ &= |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \end{aligned}$$

implicando então em

$$\rho = j^0 = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (6.24)$$

ou seja, resgatamos a ideia de que ρ é sempre positivo, o que vai equivaler a uma densidade de probabilidade, resolvendo o problema que a equação de Klein-Fock-Gordon possuía!

► Normalmente definimos $j^\mu := \pm e\bar{\psi}(\mathbf{r}, t)\gamma^\mu\psi(\mathbf{r}, t)$, onde $+e$ seria para partículas e $-e$ para antipartículas.

Exemplo 6.4: Partícula de Dirac em um campo eletromagnético

Antes de tratar de fato as equações, salientamos aqui que faremos a abordagem utilizando o potencial vetor $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ (associado ao campo

magnético por $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$ e o potencial escalar $\phi(\mathbf{r})$ (associado ao campo elétrico por $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r})$). Além disso, fazemos um deslocamento no vetor momento $\hat{\mathbf{p}} \mapsto \hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}$, pois esta mudança é invariante de gauge e nos permite determinar o momento cinético da partícula de forma mais exata.

Com estas ideias em mente, podemos passar de fato ao problema em questão. Utilizando as mudanças enunciadas, a equação (6.14) se altera para forma

$$\hat{\mathcal{H}}\psi(\mathbf{r}, t) = [\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}) + \hat{\beta}m + q\phi]\psi(\mathbf{r}, t)$$

que se estende para equação (6.19) para assumir a forma

$$Eu = [\hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}) + \hat{\beta}m + q\phi]u \quad (6.25)$$

Sendo então

$$\psi(\mathbf{r}, t) \equiv \begin{pmatrix} \psi_u(\mathbf{r}, t) \\ \psi_d(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}$$

podemos reescrever a equação (6.25) por

$$E \begin{pmatrix} \psi_u \\ \psi_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\boldsymbol{\sigma}} \\ \hat{\boldsymbol{\sigma}} & 0 \end{pmatrix} [\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}] \begin{pmatrix} \psi_u \\ \psi_d \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} m + q\phi & 0 \\ 0 & -m + q\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_u \\ \psi_d \end{pmatrix}$$

Formamos então um sistema de equações tal que

$$\begin{cases} E\psi_d = \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})\psi_d + (m + q\phi)\psi_u \\ E\psi_u = \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})\psi_u - (m - q\phi)\psi_d \end{cases}$$

A partir da segunda equação, temos

$$\psi_d(\mathbf{r}, t) = \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})}{E - q\phi + m} \psi_u(\mathbf{r}, t)$$

de modo que colocando esta expressão na primeira equação, acabamos com

$$E\psi_u(\mathbf{r}, t) = \left\{ \frac{[\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})]^2}{E - q\phi + m} + m + q\phi \right\} \psi_u(\mathbf{r}, t)$$

No limite não-relativístico, ou seja, para $E \sim m$ e $E \gg q\phi$, temos que o denominador $E - q\phi + m \approx 2m$ e portanto

$$E\psi_u(\mathbf{r}, t) = \left\{ \frac{[\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})]^2}{2m} + m + q\phi \right\} \psi_u(\mathbf{r}, t)$$

Utilizando a relação

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{u})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}) = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + i\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\mathbf{u} \times \mathbf{v})$$

obtemos

$$\begin{aligned}
 [\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})]^2 &= [\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})][\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})] \\
 &= (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2 + i\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (q\hat{\mathbf{p}} \times \mathbf{A} + q\mathbf{A} \times \hat{\mathbf{p}}) \\
 &= (\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2 + iq\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\hat{\mathbf{p}} \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times \hat{\mathbf{p}})
 \end{aligned}$$

implicando em

$$E\psi_u(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2}{2m} + \frac{iq\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{2m} \cdot (\hat{\mathbf{p}} \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times \hat{\mathbf{p}}) + m + q\phi \right] \psi_u(\mathbf{r}, t)$$

Podemos simplificar esta expressão usando $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$ no termo intermediário, tal que

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathbf{p}} \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times \hat{\mathbf{p}} &= -i\nabla \times \mathbf{A} - i\mathbf{A} \times \nabla \\
 &= -i\mathbf{B} - i\mathbf{A} \times \nabla
 \end{aligned}$$

Note, porém, que tudo isto é aplicado a $\psi_u(\mathbf{r}, t)$, de modo que ao tomarmos $\mathbf{A} \times \nabla\psi_u(\mathbf{r}, t)$ temos um termo identicamente nulo, pois $\nabla\psi_u(\mathbf{r}, t)$ vai ser paralelo ao potencial vetor, o que indica que a expressão se resume a

$$E\psi_u(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2}{2m} + \frac{q\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{2m} \cdot \mathbf{B} + m + q\phi \right] \psi_u(\mathbf{r}, t)$$

Neste limite não-relativístico, $E = m + E'$, logo

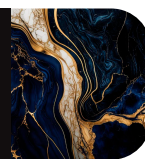
$$E'\psi_u(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2 + q\phi \right] \psi_u(\mathbf{r}, t) + \frac{q}{2m}(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B})\psi_u(\mathbf{r}, t)$$

Analisando esta expressão, temos no primeiro termo a estrutura da hamiltoniana não-relativística para partículas em um campo eletromagnético e no segundo termo uma quantidade que relaciona as matrizes de Pauli com o campo magnético. Então, definindo o spin como sendo $\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, caímos em

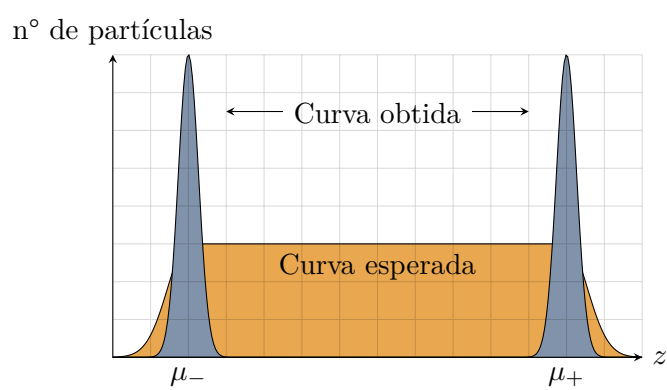
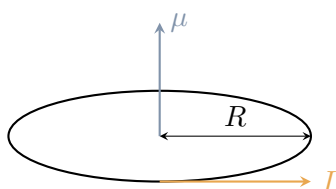
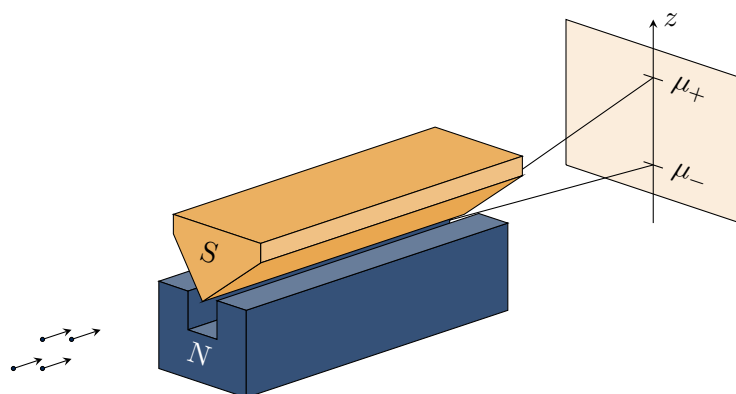
$$E'\psi_u(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{1}{2m}(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2 + q\phi + \frac{q}{m}(\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B}) \right] \psi_u(\mathbf{r}, t)$$

e assim vemos que a quantidade que conhecemos como spin aparece de forma automática, basicamente como uma propriedade puramente quântica intrínseca à característica relativística das partículas.

PARTE IV



DESENHOS (APAGAR ISSO)



Medidor de $\hat{\mu}_x$

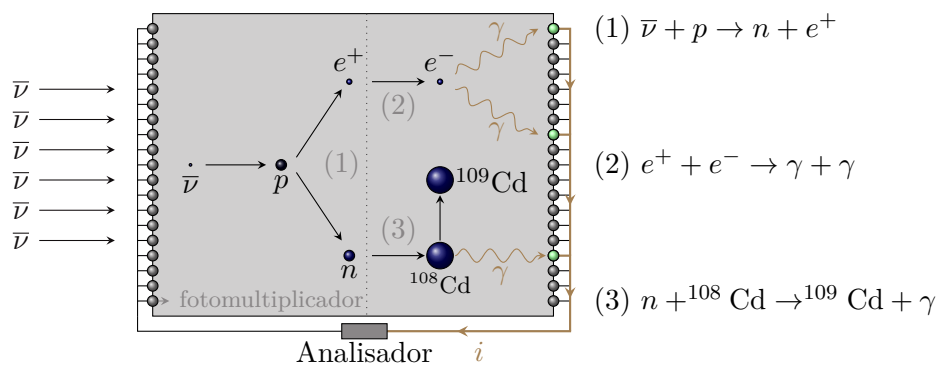
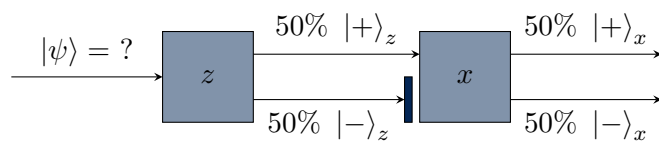
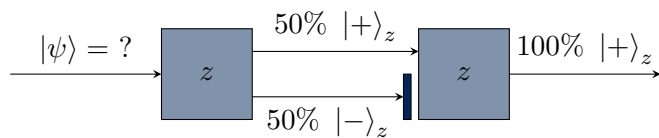
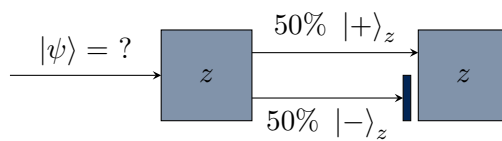
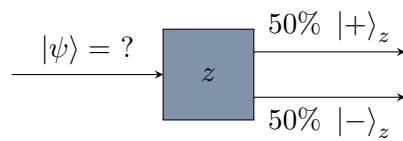


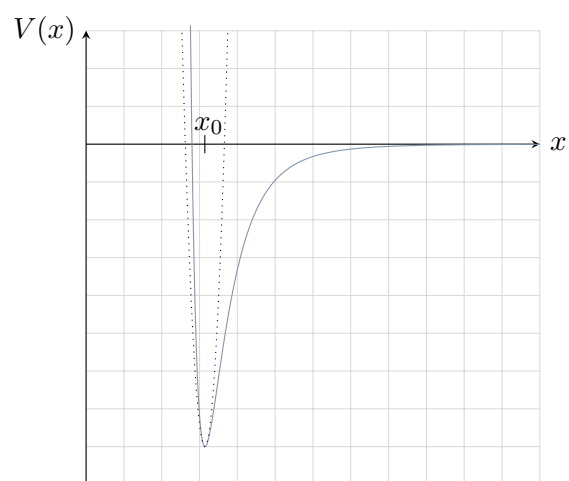
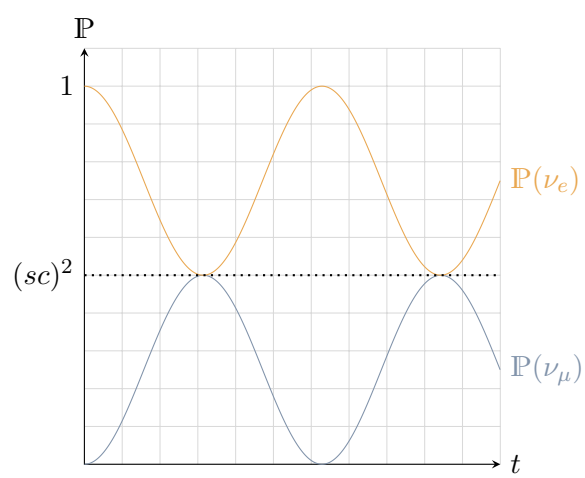
Medidor de $\hat{\mu}_y$



Medidor de $\hat{\mu}_z$

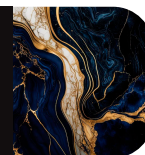








Bibliografia



- Arfken, G.B. e H.B. Weber (2000). *Mathematical Methods for Physicists*. 6th. Academic Press.
- Barata, J.C. (2023a). «Capítulo 15: Soluções de Equações Diferenciais Ordinárias Lineares no Plano Complexo». Em: pp. 769–831. URL: http://denebola.if.usp.br/~jbarata/Notas_de_aula/arquivos/nc-cap15.pdf.
- Barata, J.C. (2023b). «Capítulo 38: Introdução à Distribuições e Transformadas de Fourier». Em: pp. 1961–2071. URL: http://denebola.if.usp.br/~jbarata/Notas_de_aula/arquivos/nc-cap38.pdf.
- Born, M. (1954). «The statistical interpretation of quantum mechanics». *Nobel Lecture*.
- Chitara, T.S. (1978). *An Introduction to Orthogonal Polynomials*. 13th. Gordon e Breach Science Publishers.
- Cooper, N. G. (1997). «Los Alamos Science, Number 25 – 1997: Celebrating the neutrino». DOI: 10.2172/569122. URL: <https://www.osti.gov/biblio/569122>.
- DeBruyne, D. e L. Sorensen (2018). *Quantum Mechanics I*. Sciendo. ISBN: 978-3-11-062775-6. DOI: 10.2478/9783110627756.
- Dirac, P. A. M. (1939). «A new notation for quantum mechanics». *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **35**, p. 416. DOI: 10.1017/S0305004100021162.
- Dirac, P. A. M. (1958). *Principles of Quantum Mechanics (International Series of Monographs on Physics)*. 4th. Oxford University Press. ISBN: 978-0-19-852011-5.
- Einstein, A. (1905). «Zur Elektrodynamik bewegter körper». *Annalen der physik* **322**, p. 891.
- Einstein, A. (1914). «Die formale Grundlage der allgemeinen Relativitätstheorie». *Mitth. d. phys.-math.* **19**, p. 1030.
- Eisberg, R. e R. Resnick (1985). *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles*. 2nd. John Wiley & Sons. ISBN: 0-471-87373-X.
- Finkelstein, R.J. (1973). *Non-relativistic Mechanics*. 1st. W.A. Benjamin.
- Fock, V. (1926). «Über die invariante Form der Wellen- und der Bewegungsgleichungen für einen geladenen Massenpunkt». *Z. Physik* **39**, p. 226. DOI: 10.1007/BF01321989.

- Gabrielse, G. et al. (2007). «Erratum: New Determination of the Fine Structure Constant from the Electron g Value and QED [Phys. Rev. Lett. 97, 030802 (2006)]». *Phys. Rev. Lett.* **99**, p. 039902. DOI: [10.1103/PhysRevLett.99.039902](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.039902).
- Garboczi, E.J. (2002). «Three-dimensional mathematical analysis of particle shape using X-ray tomography and spherical harmonics: Application to aggregates used in concrete». *Cem. Concr. Res.* **32**, p. 1621. DOI: [10.1016/S0008-8846\(02\)00836-0](https://doi.org/10.1016/S0008-8846(02)00836-0).
- Gasiorowicz, S. (2003). *Quantum Mechanics*. 3rd. John Wiley & Sons. ISBN: 0-471-42945-7.
- Gordon, W. (1926). «Der Comptoneffekt nach der Schrödingerschen Theorie». *Z. Physik* **40**, p. 117. DOI: [10.1007/BF01390840](https://doi.org/10.1007/BF01390840).
- Griffiths, D.J. (2018). *Introduction to Quantum Mechanics*. 3rd. Cambridge University Press. ISBN: 978-1-107-18963-8.
- Iserles, A. e M. Webb (2021). «A Differential Analogue of Favard's Theorem». Em: Springer International Publishing, pp. 239–263. ISBN: 978-3-030-75425-9. DOI: [10.1007/978-3-030-75425-9_13](https://doi.org/10.1007/978-3-030-75425-9_13).
- Klein, O (1926). «Quantentheorie und fünfdimensionale Relativitätstheorie». *Z. Physik* **37**, p. 895. DOI: [10.1007/BF01397481](https://doi.org/10.1007/BF01397481).
- Landau, L e E.M. Lifshitz (1977). *Quantum Mechanics: Non-relativistic Theory*. 1st. Pergamon Press.
- Liboff, R.L. (1980). *Introductory Quantum Mechanics*. 2nd. Addison-Wesley Publishing Company, Inc. ISBN: 0-8053-8714-5.
- Marcellán, F. e R. Álvarez-Nodarse (2001). «On the “Favard theorem” and its extensions». *J. Comput. Appl. Math.* **127**, pp. 231–254. DOI: [10.1016/S0377-0427\(00\)00497-0](https://doi.org/10.1016/S0377-0427(00)00497-0).
- Odom, B. et al. (2006). «New Measurement of the Electron Magnetic Moment Using a One-Electron Quantum Cyclotron». *Phys. Rev. Lett.* **97**, p. 030801. DOI: [10.1103/PhysRevLett.97.030801](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.030801).
- Pauli, W. (1930). «Offener Brief an die Gruppe der Radioaktiven bei der Gauvereins-Tagung zu Tübingen». **Letter 259**. Wissenschaftlicher Briefwechsel mit Bohr, Einstein, Heisenberg. URL: <http://cds.cern.ch/record/83282/?ln=pt>.
- Planck, M. (1900a). «Über eine Verbesserung der Wienschen Spektralgleichung». *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* **2**, pp. 202–204.
- Planck, M. (1900b). «Zur Theorie des Gesetzes der Energieverteilung im Normalspectrum». *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* **2**, pp. 237–245.
- Planck, M. (1900c). «Entropie und Temperatur strahlender Wärme». *Annalen der Physik* **306.4**, pp. 719–737. DOI: [10.1002/andp.19003060410](https://doi.org/10.1002/andp.19003060410).
- Planck, M. (1900d). «Ueber irreversible Strahlungsvorgänge». *Annalen der Physik* **306.1**, pp. 69–122. DOI: [10.1002/andp.19003060105](https://doi.org/10.1002/andp.19003060105).

-
- Sakurai, J.J. e J. Napolitano (2021). *Modern Quantum Mechanics*. 3rd. Cambridge University Press. ISBN: 978-1-108-47322-4.
- Schiff, L. (1968). *Quantum Mechanics*. 3th. McGraw-Hill.
- Schwartz, M.D. (2014). *Quantum Field Theory and the Standard Model*. 1st. Cambridge University Press. ISBN: 978-1-107-03473-0.
- Science, Professor M does (2020). *Identical Particles in Quantum Mechanics*. URL: https://www.youtube.com/watch?v=1cIl3m-fmnY&ab_channel=ProfessorMdoesScience.
- Sorkin, D. R. (1983). «Kaluza-Klein Monopole». *Phys. Rev. Lett.* **51**, p. 87.
- Zettili, N. (2009). *Quantum Mechanics: Concepts and Applications*. 2nd. Wiley.
- Zwiebach, B. (2022). *Mastering Quantum Mechanics*. 1st. MIT Press. ISBN: 978-0-26-204613-8.