Cap. II - As Ferramentas Matemáticas da Mec. Quântica

II-A Espaço da função de onda de uma partícula.

Seja $\psi(\vec{r},t)$ a função de onda de uma partícula. Dizemos que $\psi(\vec{r},t)$ faz parte de um sub-espaço $\mathcal{F}^*$ do espaço das funções de quadrado integrável ($\int |\psi(\vec{r},t)|^2 dr^3$ é finita).
As funções de $\mathcal{F}$ satisfazem condições adicionais de regularidade, exigidos por um sistema físico, e.g., continuidade.
* nem toda função quadrado integrável é uma função de onda

II-A.1 Estrutura do espaço das funções de onda $\mathcal{F}$

* $\mathcal{F}$ é um espaço vetorial.

Se $\psi_1(\vec{r})$ e $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ então: $\psi(\vec{r}) = \lambda_1 \psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 \psi_2(\vec{r}) \in \mathcal{F}$, sendo λ_1 e λ_2 dois números complexos arbitrários.

Produto Escalar

Para cada par $\varphi(\vec{r})$ e $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ associamos um número complexo dado por:

$$(\varphi, \psi) = \int dr^3\, \varphi^*(\vec{r})\, \psi(\vec{r})$$

Propriedades

complexo conjugado

1) $(\varphi, \psi) = (\psi, \varphi)^*$ (A-5)

linear

2) $(\varphi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\varphi, \psi_1) + \lambda_2(\varphi, \psi_2)$ (A-6)

antilinear

3) $(\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2, \psi) = \lambda_1^*(\varphi_1, \psi) + \lambda_2^*(\varphi_2, \psi)$ (A-7)

Se $(\varphi, \psi) = 0$ φ e ψ são ditas ortogonais.

$(\psi, \psi) = \int d^3r \, |\psi(\vec{r})|^2$ é um número real, positivo e nulo somente se $\psi = 0$

$\sqrt{(\psi, \psi)}$ é a norma de $\psi(\vec{r})$

* Operadores lineares

Um operador A é por definição uma entidade que associada a qualquer função $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ leva a outra função em $\mathcal{F}$:

1) $A\psi(\vec{r}) = \psi'(\vec{r})$ ① não é derivada

2) $A[\lambda_1 \psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 \psi_2(\vec{r})] = \lambda_1 A \psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 A \psi_2(\vec{r})$

Exemplos de operadores não lineares:

$Of(x) = f(x) + x^2$
$Of(x) = [f(x)]^2$

Exemplos de operadores lineares:

$\Pi \psi(x,y,z) = \psi(-x,-y,-z) \rightarrow$ operador paridade
$X \psi(x,y,z) = x \psi(x,y,z)$
$D_x \psi(x,y,z) = \frac{\partial}{\partial x} \psi(x,y,z)$

Observação: X e D_x podem transformar uma $f \in \mathcal{F}$ numa $f \notin \mathcal{F}$!

tilibra

Produto de operadores

Sejam A e B dois operadores lineares:

$(AB)\psi(\vec{r}) = A[B\psi(\vec{r})]$, em geral $AB \neq BA$

Definimos o comutador de A e B como:

$$[A,B] = AB - BA \qquad (A\text{-}15)$$

Exemplo: $[X, D_x] = ?$

II.A.2 BASE DISCRETA ORTONORMAL NO ESPAÇO DAS FUNÇÕES DE ONDA $\mathcal{F}$: $\{u_i(\vec{r})\}$

$\{u_i(\vec{r})\}$ = subconjunto contável de funções de $\mathcal{F}$, onde $i = 1, 2, 3, \ldots, n$.

→ $\{u_i(\vec{r})\}$ é ortonormal se:

$$(u_i, u_j) = \int d^3r \; u_i^*(\vec{r}) \, u_j(\vec{r}) = \delta_{ij} \qquad \text{(A-18)}$$

onde $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 \text{ se } i = j \\ 0 \text{ se } i \neq j \end{cases}$ é a função delta de Kronecker.

→ $\{u_i(\vec{r})\}$ constitui uma base (conjunto completo de funções) se qualquer função de onda $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ pode ser expandida de uma única maneira em termos dos $u_i(\vec{r})$:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{n} c_i u_i(\vec{r}) \qquad \text{(A-19)}$$

As componentes de uma função de onda na base $\{u_i(\vec{r})\}$ podem ser obtidas multiplicando (A-19) por $u_j^*(\vec{r})$ e integrando em todo o espaço:

$$(u_j, \psi) = \left(u_j, \sum_i c_i u_i\right) = \sum_i c_i (u_j, u_i) = \sum_i c_i \delta_{ij} = c_j$$

Ou seja:

$$c_i = (u_i, \psi) = \int d^3r \; u_i^*(\vec{r}) \, \psi(\vec{r}) \qquad \text{(A-21)}$$

O conjunto de todos c_i é dito representar a função de onda $\psi(\vec{r})$ na base $\{u_i(\vec{r})\}$

Podemos fazer analogia entre a base $\{u_i(\vec{r})\}$ e a base ortogonal $\{\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3\}$ do espaço ordinário tridimensional $\mathbb{R}^3$.

$$\hat{e}_i \cdot \hat{e}_j = \delta_{ij} \leftrightarrow (u_i, u_j) = \delta_{ij}$$

$$\vec{V} = \sum_{i=1}^{3} V_i \hat{e}_i \leftrightarrow \psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$$ → entidade em função das componentes

$$V_i = \hat{e}_i \cdot \vec{V} \leftrightarrow c_i = [u_i(\vec{r}), \psi(\vec{r})]$$ → componente em uma "direção"

Produto escalar de funções de onda em termos das componentes

Sejam duas funções de onda $\varphi(\vec{r})$ e $\psi(\vec{r})$ dadas por:

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_i b_i u_i(\vec{r}) \text{ e } \psi(\vec{r}) = \sum_j c_j u_j(\vec{r})$$

Seu produto escalar pode ser escrito:

$$(\varphi, \psi) = \left[\sum_i b_i u_i(\vec{r}), \sum_j c_j u_j(\vec{r})\right]$$

$$(\varphi, \psi) = \sum_{i,j} b_i^* c_j \int d^3r \; u_i(\vec{r}) u_j(\vec{r})$$

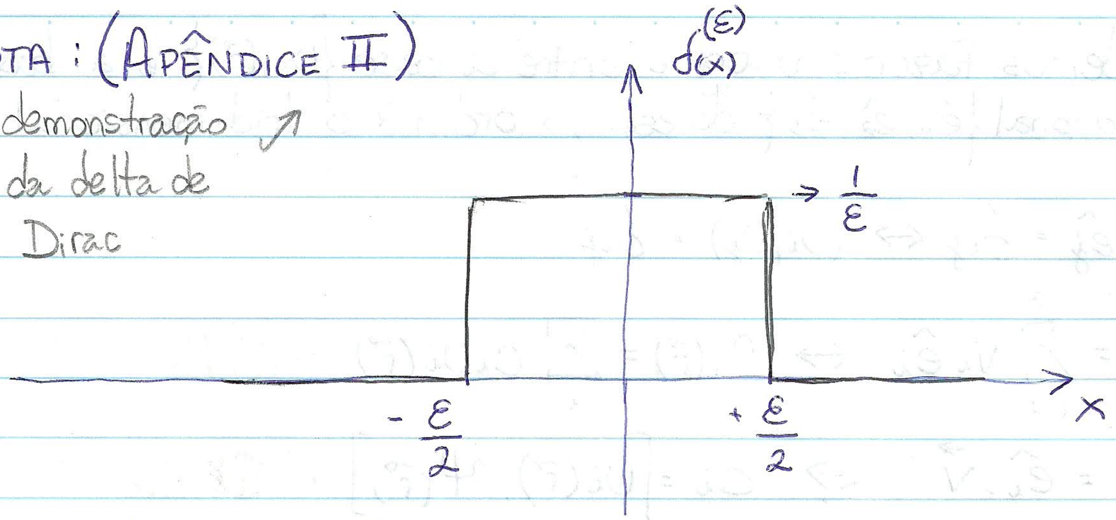
$$(\varphi, \psi) = \sum_{i,j} b_i^* c_j \delta_{ij} = \sum_i b_i^* c_i$$

Para (ψ, ψ): $(\psi, \psi) = \sum_i c_i^* c_i = \sum_i |c_i|^2$

(Em analogia com: $\vec{V} \cdot \vec{W} = \sum_{i=1}^{3} V_i W_i$)

NOTA: (APÊNDICE II)

demonstração da delta de Dirac



$$\delta^{(\varepsilon)}(x) \begin{cases} = \frac{1}{\varepsilon} & \text{para } -\frac{\varepsilon}{2} < x < +\frac{\varepsilon}{2} \\ = 0 & \text{para } |x| > \frac{\varepsilon}{2} \end{cases}$$

onde ε é um número positivo.

Seja $f(x)$ uma função bem definida em torno de $x=0$.

Vamos calcular:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \delta^{(\varepsilon)}(x)\, f(x).$$

Para ε suficientemente pequeno podemos desprezar a variação de $f(x)$ em $-\frac{\varepsilon}{2} < x < +\frac{\varepsilon}{2}$, então:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \delta^{(\varepsilon)}(x)\, f(x) = \boxed{f(0)} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \delta^{(\varepsilon)}(x) = f(0)$$

se comporta como constante porque $\varepsilon \to 0$

No limite $\epsilon \to 0$ temos a função delta de Dirac:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, f(x)\, \delta(x) = f(0)$$

Em geral:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \delta(x-x_0)\, f(x) = f(x_0)$$ → propriedade "principal"

Relação de completeza

A relação de completeza abaixo expressa o fato de que o conjunto $\{u_i(\vec{r})\}$ constitui uma base:

$$\sum_i u_i(\vec{r})\, u_i^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r}-\vec{r}') \qquad (A-32)$$

Verificação:

Qualquer função $\psi(\vec{r})$ pode ser expressa como:

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3r'\, \psi(\vec{r}')\, \delta(\vec{r}-\vec{r}') \qquad (A-33)$$

Substituindo (A-32) em (A-33) temos:

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}'\, \psi(\vec{r}') \sum_i u_i(\vec{r})\, u_i^*(\vec{r}')$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i \underbrace{\int d^3r'\, u_i^*(\vec{r}')\, \psi(\vec{r}')}_{c_i(\vec{r})}\, u_i(\vec{r})$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$$

Ou seja, $\psi(\vec{r})$ pode ser expresso na base $\{u_i(\vec{r})\}$

II.A.3 - Bases que não pertencem ao espaço $\mathcal{F}$
Espaço de ondas planas

Vimos que é útil definir transformadas de Fourier:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \bar{\psi}(p)\, e^{ipx/\hbar} \quad ; \quad \bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi(x)\, e^{-ipx/\hbar}$$

Definindo: $V_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$, onde $V_p(x)$ é uma onda plana com vetor de onda $K = p/\hbar$.

Fazendo: verificar!

$$|V_p|^2 = (V_p, V_p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} e^{ipx/\hbar} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi\hbar} dx = \infty$$

Vemos que a integral diverge, logo V_p não é uma função que pertence ao espaço $\mathcal{F}$ de funções quadrado integráveis. O número p varia contínuamente entre $-\infty$ e $+\infty$.
Em termos das $V_p(x)$ temos:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \bar{\psi}(p)\, V_p(x) \qquad (2)$$

$$\bar{\psi}(p) = (V_p, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, V_p^*(x)\, \psi(x) \qquad (3)$$

As relações acima são análogas à:

$$\psi(x) = \sum_i c_i u_i(x) \quad e \quad c_i = (u_i, \psi) = \int dx\, u_i^*(x)\, \psi(x)$$

Assim, $\overline{\psi}(p)$ e c_i representam as componentes da função de onda $\psi(x)$ nas bases $\{v_p(x)\}$ e $\{u_i(x)\}$, respectivamente. Temos também que:

$$(\psi, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, |\overline{\psi}(p)|^2 \quad \left(\text{analogo à: } (\psi, \psi) = \sum_i |c_i|^2\right)$$

RELAÇÃO DE COMPLETEZA:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp\, v_p(x)\, v_p^*(x') = \delta(x - x') \quad \left(\text{análogo à: } \sum_i u_i(\vec{r})\, u_i^*(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,')\right)$$

Produto escalar:

$$(v_p, v_{p'}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, v_p^*(x)\, v_{p'}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi\hbar}\, dx\, e^{i\frac{x}{\hbar}(p'-p)}$$

Mas: $\dfrac{1}{2\pi} \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} dk \cdot e^{iku} = \delta(u)$

Assim: $(v_p, v_{p'}) = \delta(p - p')$ $\left(\text{análoga a: } (u_i, u_j) = \delta_{ij}\right)$

Resumindo, os resultados obtidos para a base discreta $\{u_i(\vec{r})\}$, podem ser extendidas para a base contínua $\{v_p(x)\}$ fazendo as seguintes substituições:

índice

discreto $\rightarrow i \Rightarrow \vec{p} \leftarrow$ contínuo

$$\sum_i \Rightarrow \int d^3p$$

$$\delta_{ij} \Rightarrow \delta(p-p')$$

De maneira análoga, pode-se mostrar que as funções delta:

ksi

$$\xi(\vec{r}) = \delta(\vec{r}-\vec{r_0})$$

formam também uma "base" que não pertence ao espaço das funções quadrado integráveis.

(Ver seção II.A.3.b)

II.B. - Espaço de Estados - Notação de Dirac

II.B.1 - Introdução

Vimos anteriormente que a função de onda $\psi(\vec{r})$ pode ser expressa por diferentes bases, por exemplo, $\{U_i(\vec{r})\}$, $\{V_p(\vec{r})\}$.

Esta situação é análoga a encontrada no espaço tridimensional ordinário $\mathbb{R}^3$, onde um ponto no espaço pode ser representado por um conjunto de três números que são as componentes em relação a um determinado sistema de eixos (retangular, esférico, etc...)

No entanto, o cálculo vetorial me permite operar com vetores sem me referir à uma base específica. Por exemplo, quando escrevo:

$$\nabla \cdot (\nabla_\times \vec{A}) = 0 \quad \text{ou} \quad \vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{A} \cdot \vec{C})\vec{B} - (\vec{A} \cdot \vec{B})\vec{C}$$

$\nabla .$ - divergente
$\nabla \times$ - rotacional

não preciso dizer em qual base estão os vetores.

Nesse sentido, vamos dizer que o estado quântico de uma partícula será representado por um <u>vetor de estado</u> que pertence a um espaço abstrato $\mathcal{E}_{\vec{r}}$, chamado <u>espaço de estado</u> da partícula.

O que faremos em seguida é definir a notação e as regras de cálculo de vetores nesse espaço.

II.B.2 - Notação de "ket" e "bra" vetores

- $|\psi\rangle$: vetor <u>ket</u> para ψ

Para cada função de onda : $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ associamos um vetor ket $\in \mathcal{E}_{\vec{r}}$: $|\psi\rangle$

$$\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F} \iff |\psi\rangle \in \mathcal{E}_{\vec{r}}$$

Note que a dependência em $\vec{r}$ não aparece mais.
Antes de definirmos as operações no espaço $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ precisamos definir o "espaço dual" $\mathcal{E}^*$.

Espaço dual $\mathcal{E}^*$ de $\mathcal{E}$: brás

prever o conceito de funcional

Seja χ um funcional linear definido nos kets $|\psi\rangle$ de $\mathcal{E}$. Então χ associa um número complexo à todo ket $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle \in \mathcal{E} \xrightarrow{\chi} \text{número complexo } \chi(|\psi\rangle)$$

O espaço dual $\mathcal{E}^*$ é o espaço vetorial formado pelo conjunto de χ's definidos sobre os kets $|\psi\rangle$ de $\mathcal{E}$.
Um elemento de $\mathcal{E}^*$ é chamado de vetor bra ou, simplesmente, bra.

$$\chi(|\psi\rangle) = \langle\chi|\psi\rangle$$

bracket $\rightarrow$ $\langle\,|\,\rangle$

Em particular, a todo $|\varphi\rangle$ está associado um bra dado pelo produto escalar de $|\varphi\rangle$ com cada ket $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$, ou seja:

$$\langle\varphi|\psi\rangle = (|\varphi\rangle, |\psi\rangle)$$

Visto que o produto escalar é antilinear com respeito ao primeiro vetor, temos que o bra associado ao ket: $\lambda_1|\varphi_1\rangle + \lambda_2|\varphi_2\rangle$ é dado por: $\lambda_1^*\langle\varphi_1| + \lambda_2^*\langle\varphi_2|$, de modo que a correspondência ket $\Rightarrow$ bra é também antilinear. Isso implica que, se $|\lambda\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ então $\langle\lambda\psi| = \lambda^*\langle\psi|$.

(Ket é linear; bra é antilinear)

Propriedades do produto escalar $\langle\varphi|\psi\rangle$

* $\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^*$

* $\langle \varphi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \varphi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \varphi | \psi_2 \rangle$

* $\langle \lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2 | \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \varphi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \varphi_2 | \psi \rangle$

* $\langle \psi | \psi \rangle$ é um número real positivo se e somente se $|\psi\rangle = 0$

II.B.3 - Operadores Lineares

$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$

$A(\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1 A|\psi_1\rangle + \lambda_2 A|\psi_2\rangle$

$(AB)|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle)$

* Comutador $[A,B]$

$[A,B] = AB - BA$

* Elemento de matriz de A entre $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$

$\langle \varphi | A | \psi \rangle = \langle \varphi | (A|\psi\rangle) =$ número

* Exemplo de operadores lineares : Projetores

$|\psi\rangle\langle\varphi| \Rightarrow$ representa um operador

Verificação :

$|\Psi\rangle\langle\varphi|\chi|$ é um ket multiplicado por um escalar. Portanto $|\Psi\rangle\langle\varphi|$ aplicado a um ket leva a outro ket.

revisar produto escalar!

23/09/11

Somente números complexos podem ser movidos arbitrariamente:

$|\Psi\rangle\lambda = \lambda|\Psi\rangle$

operador $\langle\Psi|\lambda = \lambda\langle\Psi|$

$A\lambda|\Psi\rangle = \lambda A|\Psi\rangle$

$\langle\varphi|\lambda|\Psi\rangle = \lambda\langle\varphi|\Psi\rangle$

$\langle\Psi|\varphi\rangle$ - número complexo (estado)

$|\varphi\rangle\langle\Psi|$ - operador

$|\Psi\rangle A \Rightarrow$ não tem sentido!

Mas para ket, bra e operadores, a ordem deve ser respeitada rigorosamente.

Projetor P_Ψ

Define-se: $P_\psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$,
sendo $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$

$$P_\psi|\varphi\rangle = |\Psi\rangle\langle\Psi|\varphi\rangle = \text{ket proporcional a } |\Psi\rangle$$

A interpretação "geométrica" de P_ψ: é o operador "projeção ortogonal" sobre o ket $|\Psi\rangle$

Temos também: $P_\psi^2 = P_\psi$, pois:

$$P_\psi^2 = |\Psi\rangle\langle\Psi|\Psi\rangle\langle\Psi| = |\Psi\rangle\langle\Psi| = P_\psi$$

23/09/11

Bra - "funcional" de um espaço dual (existe). Ket - estado (vetor) num espaço que não necessita de uma base definida!

Projetor num sub-espaço.

$\{|\varphi_i\rangle\}$ = vetores normalizados e ortogonais entre si com $i = 1, 2, \ldots, q$.

$\mathcal{E}_q \Rightarrow$ subespaço de $\mathcal{E}$ cuja base é formada pelos q vetores $\{|\varphi_i\rangle\}$

$$P_q = \sum_{i=1}^{q} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \Rightarrow \text{projeta qualquer } |\psi\rangle \in \mathcal{E} \text{ no sub-espaço } \mathcal{E}_q$$

II B.4 Conjugação Hermitiana

$\langle\varphi|A \Rightarrow$ funcional linear (bra) pois:

$\left(\langle\varphi|A\right)|\psi\rangle = \langle\varphi|\left(A|\psi\rangle\right) = \langle\varphi|A|\psi\rangle =$ (número complexo) que é o elemento de matriz de A entre $\langle\varphi|$ e $|\psi\rangle$.

Obs.: $\langle\varphi|A \neq \underbrace{A\langle\varphi|}_{\text{não tem sentido}}$

Operador Adjunto

dagger ($\dagger$)

$$\begin{array}{lcl} \mathcal{E}: & |\psi\rangle \xrightarrow{A} |\psi'\rangle = A|\psi\rangle & \text{(I)} \\ & \updownarrow \qquad\qquad \updownarrow & \\ \mathcal{E}^*: & \langle\psi| \xrightarrow{A^\dagger} \langle\psi'| = \langle\psi|A^\dagger & \end{array}$$

A cada $A|\psi\rangle$ corresponde $\langle\psi|A^\dagger$

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle \longrightarrow \langle\psi'| = \langle\psi|A^\dagger \qquad \text{(II)}$$

Mas: $\langle \psi' | \varphi \rangle = \langle \varphi | \psi' \rangle^*$ (III)

Substituindo I e II em III, temos:

$$\langle \psi | A^\dagger | \varphi \rangle = \langle \varphi | A | \psi \rangle^*$$, onde $A^\dagger$ é o operador adjunto de A

↳ ou Hermitiano conjugado

Correspondência entre um operador e seu adjunto.

$(A^\dagger)^\dagger = A$ provar

$(\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger$

$(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$

$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$

provar

Em particular, $\langle \psi |$ é o hermitiano de $| \psi \rangle$.

Prova:

$$\langle \psi | \left(|u\rangle\langle v| \right)^\dagger | \varphi \rangle = \langle \varphi | u \rangle \langle v | \psi \rangle^* = \langle \varphi | u \rangle^* \langle v | \psi \rangle^* =$$

$$= \langle u | \varphi \rangle \langle \psi | v \rangle = \langle \psi | v \rangle \langle u | \varphi \rangle = \langle \psi | \left(|v\rangle\langle u| \right) | \varphi \rangle$$, portanto:

$$\left(|u\rangle\langle v| \right)^\dagger = |v\rangle\langle u|$$

* Regras para obter o hermitiano conjugado ou adjunto

constantes → complexos conjugados

kets → bras

bras → kets

operadores → adjuntos

reverter a ordem dos fatores

tilibra

Exemplo:

$$(\lambda\langle U|A|V\rangle |W\rangle\langle\varphi|)^{\dagger} = |\psi\rangle\langle W|\,\langle V|A^{\dagger}|U\rangle\,\lambda^* =$$

$$= \lambda^*\langle V|A^{\dagger}|U\rangle\,|\psi\rangle\langle W|$$

Operadores Hermitianos

Um operador é dito hermitiano se $A^{\dagger} = A$
Usando $\langle\psi|A^{\dagger}|\varphi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle^*$ e o fato de que $A^{\dagger} = A$ obtemos:

$$\langle\psi|A|\varphi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle^*$$

Os operadores hermitianos tem um papel fundamental na Mecânica Quântica pois veremos que toda grandeza física mensurável é representada por um operador hermitiano.

$$(\langle\psi|A^{\dagger}|\varphi\rangle)^* = (\langle\varphi|A|\psi\rangle^*)^* = \langle\varphi|A|\psi\rangle$$

Por outro lado:

$$\langle\varphi|(A^{\dagger})^{\dagger}|\psi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle$$

Portanto: $(A^{\dagger})^{\dagger} = A$

II.C. REPRESENTAÇÕES NO ESPAÇO DE ESTADOS

Escolher uma representação significa escolher uma base ortogonal, que pode ser contínua ou discreta.
Numa determinada representação (ou base) vetores e operadores são representados por números complexos: componentes para vetores e elementos de matriz para operadores.

II.C.2. RELAÇÕES CARACTERÍSTICAS DE UMA BASE ORTOGONAL

Vamos reescrever as duas condições para termos uma base: a relação de ortonormalização e a de fechamento, usando agora a notação de Dirac.

índices discretos (contáveis)

$$(U_i, U_j) = \delta_{ij} \longrightarrow \langle U_i | U_j \rangle = \delta_{ij}$$

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_i c_i U_i(\vec{r}) \longrightarrow |\Psi\rangle = \sum_i c_i |U_i\rangle$$

base discreta

índices contínuos

$$(W_\alpha, W_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha') \longrightarrow \langle W_\alpha | W_{\alpha'} \rangle = \delta(\alpha - \alpha')$$

$$\Psi(\vec{r}) = \int c(\alpha) W_\alpha(\vec{r})\, d\alpha \longrightarrow |\Psi\rangle = \int d\alpha\, c(\alpha) |W_\alpha\rangle$$

base contínua

Fazendo o produto escalar por $\langle U_j|$ e $\langle W_{\alpha'}|$, respectivamente, e usando a ortogonalidade temos:

$$\langle U_j | \Psi \rangle = c_j \quad e \quad \langle W_{\alpha'} | \Psi \rangle = c(\alpha')$$

Substituindo, agora, na função de onda escrita na base discreta:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle = \sum_i \langle u_i|\psi\rangle\, |u_i\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle$$

Portanto: $\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \mathbb{1} =$ (operador identidade no espaço $\mathcal{E}$)

Assim: $$P_{\{u_i\}} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \mathbb{1} \qquad (C.9)$$

e: $$P_{\{w_\alpha\}} = \int d\alpha\, |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha| = \mathbb{1} \qquad (C.10)$$

São projetores sobre todo o espaço $\mathcal{E}$. Essas relações são conhecidas como "relações de completeza", pois:

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$$

Assim, as relações básicas para a representação $\{|u_i\rangle\}$ são:

$$\langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij}$$

$$P_{\{u_i\}} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \mathbb{1}$$

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*$$

$$\langle\varphi|A^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|A|\varphi\rangle^*$$