Mecânica Quântica - Aula 3 - Interlúdio Matemático 1

A análise do experimento de Stern-Gerlach feita nas aulas anteriores mostrou diversos aspectos fundamentais da MQ que diferem profundamente de suas contrapartes clássicas. Em particular, vimos que os conceitos clássicos de estado e espaço de estados não se aplicam à MQ. Nesta aula começaremos a desenvolver o ferramental matemático necessário a devida representação de tais conceitos centrais no contexto quântico.

Como veremos posteriormente os espaços de estados na mecânica quântica são representados por uma estrutura matemática denominada espaço de Hilbert, que é um tipo especial de espaço vetorial sobre o corpo dos números complexos, enquanto que os estados são representados por certas classes de vetores nesses espaços. Nesta aula faremos uma breve revisão dos números complexos e de espaços vetoriais para podermos introduzir o conceito de espaços de Hilbert.

3.1 — Números Complexos

Os números complexos surgiram da necessidade de se obter soluções para equações da forma:

$$x^2 + 1 = 0,$$

que não possuem raízes reais. Desde o século 16 o símbolo $i = \sqrt{-1}$ tem sido usado para o estudo das soluções de tais equações. Contudo, tal desenvolvimento permaneceu puramente formal (sem o devido rigor matemático) por aproximadamente 300 anos. Foi apenas no início do século 19 que Gauß e Hamilton independentemente propuseram uma definição satisfatória dos números complexos em termos de pares ordenados de números reais dotados de certas propriedades especiais.

Definição 3.1: "Sejam $a, b \in \mathbb{R}$, denominamos o par ordenado (a,b) um número complexo desde que a relação de igualdade e as operações de soma e multiplicação de tais pares ordenados estejam definidas da seguinte forma:

(a) Igualdade: $(a,b) = (c,d) \iff a=b,\ c=d,\ \forall a,b,c,d \in \mathbb{R}$;

(b) Soma: $(a,b) + (c,d) = (a+c, b+d),\ \forall a,b,c,d \in \mathbb{R}$;

(c) Multiplicação: $(a,b)(c,d) = (ac-bd,\ ad+bc),\ \forall a,b,c,d \in \mathbb{R}$."

Os números complexos são usualmente denotados por $\mathbb{C}$.

É possível a partir da definição 3.1 mostrar que os números complexos em conjunto com as operações de soma e multiplicação formam um corpo:

Teorema 3.2: "Os números complexos satisfazem os 6 axiomas de corpo. Sejam $\forall a,b,c \in \mathbb{C}$:

1) Comutatividade: $a+b = b+a$, $a \cdot b = b \cdot a$;

2) Associatividade: $a+(b+c) = (a+b)+c$, $a \cdot (b \cdot c) = (a \cdot b) \cdot c$;

3) Distributividade: $a \cdot (b+c) = a \cdot b + a \cdot c$;

4) Elementos Neutros: $\exists!\ 0 = (0,0),\ 1 = (1,0) \in \mathbb{C} \mid a+0 = a,\ a \cdot 1 = a$;

5) Oposto: $\forall a \in \mathbb{C},\ \exists!\ (-a) \in \mathbb{C} \mid a + (-a) = 0$;

6) Inverso: $\forall a \in \mathbb{C},\ \exists!\ a^{-1} \mid a \cdot a^{-1} = 1$."

Logo, os números complexos, assim como os mais familiares números reais, constituem um objeto matemático denominado corpo. Conseqüentemente, todos os resultados algébricos usuais que decorrem unicamente dos axiomas de corpo para os números reais também são válidos para os números complexos.

Seja $C_0 \subseteq \mathbb{C}$ o seguinte subconjunto:

$$C_0 = \{ a \in \mathbb{C} \mid a = (a_1, 0) \}.$$

Naturalmente, $a_1 \in \mathbb{R}$. Note que C_0 é fechado sob as operações de soma e multiplicação, i.e.,

$$\forall\, a = (a_1, 0),\, b = (b_1, 0) \in C_0 \,, \quad a + b = (a_1 + b_1, 0) \in C_0$$
$$a \cdot b = (a_1 \cdot b_1, 0) \in C_0 .$$

Dessa forma, podemos introduzir a seguinte função:

$$f : \mathbb{R} \longrightarrow C_0 \,, \quad \mathbb{R} \ni x_1 \longmapsto f(x_1) = (x_1, 0) = x \in C_0 .$$

Como tal função é bijetora e satisfaz:

$$f(a_1 + b_1) = f(a_1) + f(b_1) \,, \quad f(a_1 \cdot b_1) = f(a_1) \cdot f(b_1) \,, \quad \forall a_1, b_1 \in \mathbb{R}$$

concluímos que ela constitui um isomorfismo entre $\mathbb{R}$ e $C_0 \subseteq \mathbb{C}$. Notadamente, não há qualquer diferença do ponto de vista algébrico entre corpos isomórficos. É um exercício simples verificar que C_0 constitui um corpo.

A existência do isomorfismo entre C_0 e $\mathbb{R}$ nos permite identificar números complexos da forma $(a_1, 0) \in C_0 \subseteq \mathbb{C}$ com os números reais $a_1 \in \mathbb{R}$ de uma forma única. Logo, podemos afirmar que $\mathbb{R} \subseteq \mathbb{C}$, ou seja, que o corpo dos números complexos $\mathbb{C}$ constitui uma extensão do corpo dos números reais $\mathbb{R}$.

Por outro lado números complexos da forma $a = (0, a_2) \in \mathbb{C}$ satisfazem:

$$a^2 = (0, a_2) \cdot (0, a_2) = (0 \cdot 0 - a_2 \cdot a_2,\, 0 \cdot a_2 + a_2 \cdot 0) = (-a_2^2, 0).$$

Em particular, se $a_2 = 1$, temos que:

$$(0,1)^2 = (-1,0) = -1 .$$

Denotamos tal número complexo por i, i.e., $i := (0,1)$. Claramente, $i^2 = -1$. Com isso podemos finalmente relacionar a notação de par ordenado da definição 3.1 com a notação usual. Para tanto, notamos que:

$$(b,0)\cdot(0,1) = (0,b) \quad , \; \forall b \in \mathbb{R} .$$

Logo, se $a = (a,0) \in \mathbb{R}$ e $b = (b,0) \in \mathbb{R}$, temos para $(a,b) \in \mathbb{C}$ que:

$$(a,b) = (a,0) + (0,b) = (a,0) + (b,0)(0,1) = a + ib .$$

Com isso demonstramos o seguinte teorema:

Teorema 3.3: " Qualquer número complexo $(a,b) \in \mathbb{C}$ pode ser escrito como

$$(a,b) = a + ib \text{, onde } a,b \in \mathbb{R} ."$$

Interpretação Geométrica

Ao introduzirmos os números complexos como pares ordenados de números reais, $\mathbb{C} \ni a = (a_1, a_2)$, $a_1, a_2 \in \mathbb{R}$, que podem ser naturalmente representados por pontos em um plano, herdamos tal representação para os números complexos. Neste contexto, o plano xy é denominado plano complexo. O eixo $\hat{O}x$ é usualmente denominado eixo real, enquanto que o eixo $\hat{O}y$, eixo imaginário.

Se $\mathbb{C} \ni z = (x,y) \neq (0,0)$, podemos expressar x e y em termos de coordenadas polares:

$$x = r\cos\theta \;,\; y = r\sin\theta$$

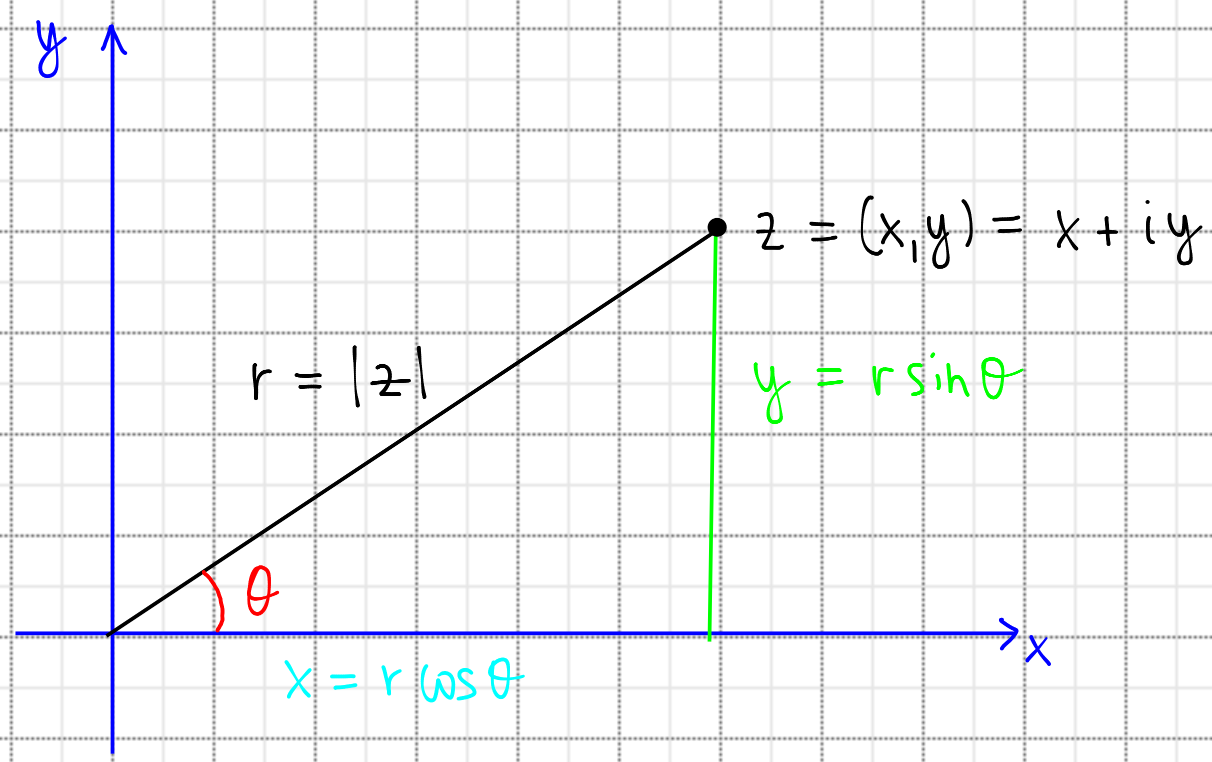
de forma que:

$$z = x + iy = r(\cos\theta + i\sin\theta),$$

O número positivo r, que representa a distância de (x,y) à origem, é denominado módulo ou valor absoluto de $z = x + iy$ e é usualmente denotado por:

$$|z| = r = \sqrt{x^2+y^2}.$$

O ângulo θ é denominado argumento de $z \in \mathbb{C}$. Naturalmente, para um dado número complexo, determinamos o argumento a menos de um múltiplo de 2π.



Como o valor absoluto de um número complexo $z \in \mathbb{C}$ corresponde à norma do vetor $(x,y) \in \mathbb{R}^2$. Temos trivialmente a validade do seguinte teorema:

Teorema 3.4: " São válidas as seguintes propriedades:

1) Positividade Definida: $|z| \geq 0$, $\forall z \in \mathbb{R}$. Ademais, $|z| = 0 \iff z = 0$;

2) Simetria: $|z_1 - z_2| = |z_2 - z_1|$, $\forall z_1, z_2 \in \mathbb{C}$;

3) Desigualdade Triangular: $|z_1 + z_2| \leq |z_1| + |z_2|$, $\forall z_1, z_2 \in \mathbb{C}$;

4) Homogeneidade: $|z_1 \cdot z_2| = |z_1| \cdot |z_2|$, $\forall z_1, z_2 \in \mathbb{C}$."

Uma outra operação importante definida sobre o corpo dos complexos é a conjugação complexa, que definimos a seguir:

Definição 3.5: "A conjugação complexa é uma involução "$-$" : $\mathbb{C} \longrightarrow \mathbb{C}$,

$$\mathbb{C} \ni z = x + iy \longmapsto \bar{z} = x - iy \in \mathbb{C}."$$

Geometricamente, $\bar{z}$ representa a reflexão de $z \in \mathbb{C}$ pelo eixo real. Deixamos a demonstração do teorema seguinte a cargo do leitor:

Teorema 3.6: "Sejam $z_1, z_2 \in \mathbb{C}$, então são válidas as seguintes propriedades:

1) $\overline{z_1 + z_2} = \bar{z}_1 + \bar{z}_2$;

2) $\overline{z_1 \cdot z_2} = \bar{z}_1 \cdot \bar{z}_2$

3) $z_1 \cdot \bar{z}_1 = |z_1|^2$."

Nossa próxima definição fornece uma extensão da função exponencial que permite considerarmos argumentos complexos de uma forma consistente com a definição usual.

Definição 3.7: "Seja $\mathbb{C} \ni z = x + iy$, definimos a exponencial (complexa) como a seguinte função:

$$\text{Exp} : \mathbb{C} \to \mathbb{C}, \quad \mathbb{C} \ni z = x + iy \longmapsto \text{Exp}(z) \equiv e^z = e^x(\cos y + i \sin y)."$$

Note que quando $z \in \mathbb{R}$, i.e., $y = 0$, na definição 3.7, $e^z = e^x$, ou seja, a exponencial complexa reduz a exponencial usual sobre $\mathbb{R}$. Os próximos teoremas estabelecem propriedades centrais da exponencial complexa:

Teorema 3.8: "Sejam $a, b \in \mathbb{C}$, então $e^a \cdot e^b = e^{a+b}$."

Teorema 3.9: "Qualquer número complexo não-nulo admite uma representação polar, i.e., seja $\mathbb{C} \ni z \neq 0$, então $z = re^{i\theta}$ onde $r = |z|$ e $\theta = \arg(z) + 2\pi n$, $n \in \mathbb{Z}$."

Em termos da representação polar, o produto de dois números complexos é:

$$z_1 \cdot z_2 = r_1 e^{i\theta_1} \cdot r_2 e^{i\theta_2} = r_1 \cdot r_2 \, e^{i(\theta_1 + \theta_2)}, \quad \forall z_1, z_2 \in \mathbb{C}.$$

Enquanto que a conjugação complexa fica:

$$\overline{z} = \overline{re^{i\theta}} = r e^{-i\theta}, \quad \forall z \in \mathbb{C}.$$

A exponencial complexa é apenas um exemplo particularmente importante de uma classe enorme de funções que mapeiam os números complexos neles mesmos, i.e., $f: \mathbb{C} \to \mathbb{C}$. Claramente, todas as funções da forma $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ são exemplos de funções de $\mathbb{C}$ em $\mathbb{C}$. Uma classe de funções complexas que utilizaremos muito no decorrer do curso é a seguinte:

$$f: \mathbb{R} \to \mathbb{C}, \quad x \in \mathbb{R} \mapsto f(x) = u(x) + i v(x) \in \mathbb{C}; \quad u, v: \mathbb{R} \to \mathbb{R}.$$

Os conceitos de continuidade, diferenciabilidade e integrabilidade são facilmente estendidos para tais funções.

Definição 3.10: "Seja $f: D \subseteq \mathbb{R} \to \mathbb{C}$, i.e., $f(x) = u(x) + i v(x)$, $\forall x \in D$ com $u, v: D \subseteq \mathbb{R} \to \mathbb{R}$. Dizemos que f é contínua no ponto $a \in D$ se ambas u e v forem contínuas em a. A derivada de f é definida como:

$$f'(x) = u'(x) + i v'(x)$$

desde que existam as derivadas $u'(x)$ e $v'(x)$. Similarmente, definimos a integral de f no intervalo $[a,b] \subseteq D$ como:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b u(x)\,dx + i\int_a^b dx\, v(x),$$

desde que ambas as integrais $\int_a^b dx\, u(x)$ e $\int_a^b dx\, v(x)$ existam."

3.2 - Espaços Vetoriais

Comecemos com uma definição abstrata do conceito de vetor.

Definição 3.11: "Um espaço vetorial V sobre um corpo $\mathbb{K}$ é um conjunto de elementos, doravante denominados vetores ou kets, $\{|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle, \dots\}$, dotado de duas operações:

(i) Soma: "$+$": $V \times V \to V$, $(|a\rangle, |b\rangle) \mapsto (|a\rangle + |b\rangle)$;

(ii) Produto por Escalar: "$\cdot$": $\mathbb{K} \times V \to V$, $(\alpha, |a\rangle) \mapsto \alpha|a\rangle$;

que satisfazem os seguintes axiomas. Sejam $|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle \in V$ e $\alpha, \beta \in \mathbb{K}$.

(1) Comutatividade: $|a\rangle + |b\rangle = |b\rangle + |a\rangle$;

(2) Associatividade da Soma: $|a\rangle + (|b\rangle + |c\rangle) = (|a\rangle + |b\rangle) + |c\rangle$;

(3) Elemento Neutro: $\exists!\, |0\rangle \in V \mid |a\rangle + |0\rangle = |a\rangle$;

(4) Oposto: $\forall\, |a\rangle \in V, \exists!\, (-|a\rangle) \mid |a\rangle + (-|a\rangle) = |0\rangle$;

(5) Associatividade do Produto: $\alpha(\beta|a\rangle) = (\alpha\beta)|a\rangle$;

(6) Identidade: $1 \cdot |\alpha\rangle = |\alpha\rangle$, onde $1 \in \mathbb{K}$ é a identidade do corpo $\mathbb{K}$.

(7) Distributividade do Produto: $\alpha \cdot (|a\rangle + |b\rangle) = \alpha \cdot |a\rangle + \alpha \cdot |b\rangle$;

(8) Distributividade da Soma: $(\alpha + \beta) \cdot |a\rangle = \alpha \cdot |a\rangle + \beta \cdot |a\rangle$."

É usual denominar os elementos do corpo sobre o qual se constitui o espaço vetorial de escalares. Adicionalmente é usual identificar o vetor nulo $|0\rangle$ com o escalar 0.

Exemplo 3.12: "O corpo dos números complexos $\mathbb{C}$ constitui um espaço vetorial sobre $\mathbb{C}$ com as mesmas operações de soma e produto definidas em $\mathbb{C}$."

Exemplo 3.13: "O produto cartesiano $\mathbb{C}^n = \{(z_1, \dots, z_n)^T, \ z_j \in \mathbb{C}, \ 1 \leq j \leq n\}$ é um espaço vetorial sobre $\mathbb{C}$ com as seguintes operações:

(i) Soma: $(z_1, \dots, z_n)^T + (w_1, \dots, w_n)^T = (z_1 + w_1, \dots, z_n + w_n)^T$;

(ii) Produto por escalar: $\alpha \cdot (z_1, \dots, z_n)^T = (\alpha z_1, \dots, \alpha z_n)^T, \ \forall \alpha \in \mathbb{C}$.

O vetor nulo é $(0, \dots, 0)^T$."

Dada a importância do exemplo 3.13 para o desenvolvimento do curso, vamos ilustrar em detalhes o caso bidimensional, i.e., com $n=2$.

$$\mathbb{C}^2 = \left\{ |z\rangle = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}, \quad z_1, z_2 \in \mathbb{C} \right\}$$

neste caso a soma é simplesmente

$$|z\rangle + |w\rangle = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 + w_1 \\ z_2 + w_2 \end{pmatrix}$$

e o produto por escalar:

$$\alpha \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha z_1 \\ \alpha z_2 \end{pmatrix}$$

Um conceito de extrema importância é o de (in)dependência linear.

Definição 3.14: "Seja V um espaço vetorial sobre $\mathbb{K}$. Um conjunto finito de vetores de V, $\{|a_i\rangle \in V, 1 \leq i \leq n\}$ é dito ser linearmente dependente se existir um conjunto de escalares $\{\alpha_i \in \mathbb{K}, 1 \leq i \leq n\}$, nem todos nulos tais que:

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

Um conjunto arbitrário de vetores é dito linearmente independente se não possuir nenhum subconjunto finito que seja linearmente dependente."

A partir do qual podemos introduzir o conceito de base algébrica.

Definição 3.15: "Uma base algébrica em um espaço vetorial V é um conjunto $B = \{|b_i\rangle, i \in I\}$ de vetores linearmente independentes, onde I denota um conjunto arbitrário não-vazio de índices, tal que qualquer vetor $|a\rangle \in V$ possa ser escrito como uma combinação linear finita de elementos de B."

Assim, se B é uma base algébrica de V, existem escalares $\alpha_1, \ldots, \alpha_n \in \mathbb{K}$ univocamente definidos e índices $i_1, \ldots i_n \in I$ tais que:

$$|a\rangle = \sum_{k=1}^{n} \alpha_{i_k} |b_{i_k}\rangle.$$

Os escalares $\alpha_{i_k} \in \mathbb{K}$ são denominados componentes do vetor $|a\rangle$ com respeito à base B.

É uma conseqüência do lema de Zorn que todo espaço vetorial V, que não o trivial, i.e., $V = \{0\}$, possui uma base algébrica e que todas as bases de V possuem a mesma cardinalidade.

Definição 3.16: "Um espaço vetorial V é dito ser de dimensão algébrica finita se possuir uma base algébrica finita. Neste caso dizemos que a dimensão de V, $\dim V$, é igual ao número de elementos de sua base."

Naturalmente, nem todo espaço vetorial tem uma base algébrica finita.

3.3 - O Dual Algébrico

Seja V um espaço vetorial sobre o corpo $\mathbb{K}$ e considere uma aplicação $\ell : V \to \mathbb{K}$, definida sobre todo V. Dizemos que ℓ é um funcional linear se

$$\ell(\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle) = \alpha\,\ell(|a\rangle) + \beta\,\ell(|b\rangle), \ \forall \alpha,\beta \in \mathbb{K}, \ \forall |a\rangle, |b\rangle \in V.$$

O conjunto de todos os funcionais lineares de V em $\mathbb{K}$ é denominado espaço dual algébrico de V e denotado por V'. Tal conjunto também constitui um espaço vetorial sobre $\mathbb{K}$, pois a combinação linear de dois funcionais lineares quaisquer $\ell, m \in V'$

$$(\alpha\ell + \beta m)(|a\rangle) = \alpha\,\ell(|a\rangle) + \beta\, m(|a\rangle), \ \forall |a\rangle \in V, \ \forall \alpha,\beta \in \mathbb{K},$$

também é um funcional linear. O vetor nulo de V' é o funcional linear que leva qualquer vetor de V a zero, i.e., $\ell(|a\rangle) = 0, \ \forall |a\rangle \in V$.

Uma notação mais conveniente para os elementos $\ell \in V'$ do espaço vetorial dual é em termos dos bras $\langle \ell | \in V'$. Dessa forma, ao denotarmos $\ell \equiv \langle \ell |$, a ação de um funcional linear sobre um vetor de V fica simplesmente:

$$\ell(|v\rangle) = \langle \ell | v\rangle, \ \forall \ell = \langle \ell | \in V', \ \forall |v\rangle \in V.$$

Essa notação é particularmente útil por expressar a igualdade de status entre V e V'.

Em termos da notação de Dirac de bras e kets, as propriedades de linearidade ficam mais transparentes:

$$(\lambda \langle l| + \mu \langle m|)|a\rangle = \lambda \langle l|a\rangle + \mu \langle m|a\rangle$$

$$\langle l|(\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle) = \alpha\langle l|a\rangle + \beta\langle l|b\rangle$$

$$\forall \alpha,\beta,\lambda,\mu \in \mathbb{K} \; ; \; |a\rangle,|b\rangle \in V \, , \; \langle l|, \langle m| \in V'.$$

3.4 - A Relação entre V e V'

Vamos agora explorar a relação que existe entre os espaços vetoriais V e V'. Por simplicidade consideramos inicialmente apenas o caso em que V tenha dimensão finita. Seja V um espaço vetorial sobre $\mathbb{K}$ tal que $\dim V = n$. Logo, existe uma base finita para V:

$$B = \{ |b_j\rangle \in V, \; 1 \leq j \leq n \},$$

de forma que qualquer $|v\rangle \in V$ pode ser escrito como:

$$\sum_{j=1}^{n} v_j |b_j\rangle .$$

Para $1 \leq k \leq n$ consideremos os seguintes funcionais lineares:

$$\langle b_k| : V \longrightarrow \mathbb{K} \, , \; |v\rangle \longmapsto \langle b_k|v\rangle = v_k .$$

Provemos que tais $\langle b_k|$ de fato constituem funcionais lineares. Para tanto consideramos a ação de $\langle b_k|$ na seguinte combinação linear:

$$\alpha|v\rangle + \beta|u\rangle = \alpha \sum_{j=1}^{n} v_j|b_j\rangle + \beta \sum_{j=1}^{n} u_j|b_j\rangle = \sum_{j=1}^{n} (\alpha v_j + \beta u_j)|b_j\rangle$$

$$\Rightarrow \langle b_k|(\alpha|v\rangle + \beta|u\rangle) = \alpha v_k + \beta u_k = \alpha\langle b_k|v\rangle + \beta\langle b_k|u\rangle.$$

Em particular, temos que a ação de $\langle b_k| \in V'$ nos elementos da base de V é:

$$\langle b_k, b_j\rangle = \delta_{kj} .$$

Mostramos a seguir que o conjunto

$$B' = \{ \langle b_k | \in V', \ 1 \leq k \leq n \}$$

constitui uma base para V'. De fato, para qualquer $\langle \ell | \in V'$ temos que:

$$\langle \ell | v \rangle = \langle \ell | \left(\sum_{j=1}^{n} v_j | b_j \rangle \right) = \sum_{j=1}^{n} v_j \langle \ell | b_j \rangle = \sum_{j=1}^{n} \langle b_j | v \rangle \langle \ell | b_j \rangle =$$

$$= \left(\sum_{j=1}^{n} \langle \ell | b_j \rangle \langle b_j | \right) | v \rangle$$

como tal expressão é válida $\forall |v\rangle \in V$ concluímos que:

$$\langle \ell | = \sum_{j=1}^{n} \langle \ell | b_j \rangle \langle b_j | ,$$

estabelecendo que qualquer elemento $\langle \ell | \in V'$ pode ser escrito como uma combinação linear dos elementos de B'. Resta verificarmos que B' é linearmente independente. Para tanto, consideramos a seguinte combinação linear:

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_j \langle b_j | = 0$$

atuando sobre os elementos $|b_k\rangle \in B$, $1 \leq k \leq n$:

$$\Rightarrow \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \langle b_j | b_k \rangle = 0 \Rightarrow \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \delta_{jk} = 0 \Rightarrow \alpha_k = 0, \quad 1 \leq k \leq n.$$

O conjunto B' é denominado base dual canônica. É um exercício simples constatar que tal base é única.

Conseqüentemente, demonstramos que para espaços de dimensão finita existe uma bijeção entre os elementos de uma base $B \subset V$ e de uma base $B' \subset V'$. Logo, da definição de base decorre que existe uma bijeção entre V e V'. Portanto, se V for de dimensão finita ele é isomorfo ao seu dual V'.

O caso no qual V é um espaço vetorial com dimensão infinita é significativamente mais complicado. Por isso não o discutiremos em detalhes aqui. Contudo, usa importância no contexto da MQ, demanda que ao menos enunciemos os resultados pertinentes. De fato, se V for um espaço vetorial de dimensão infinita é ainda possível construir uma aplicação injetora entre V e V'. Contudo, tal aplicação não será necessariamente sobrejetora, ou seja podem existir elementos de V' que não correspondem a nenhum vetor de V. Dito de outra forma tal aplicação mapeia injetivamente V em um subconjunto próprio $\tilde{V} \subset V'$.

Exemplo 3.17: "Seja $V = \mathbb{C}^n$ sobre o corpo $\mathbb{C}$ e considere o seguinte conjunto de números complexos (fixos) $\{\alpha_j \in \mathbb{C},\ 1 \leq j \leq n\}$. Podemos definir um funcional linear da seguinte forma:

$$\langle \ell | : \mathbb{C}^n \longrightarrow \mathbb{C};\quad \ell : |v\rangle = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} \longmapsto \langle \ell | v \rangle = \sum_{j=1}^{n} \bar{\alpha}_j v_j ."$$

Exercício 3.18: "Verifique que $\langle \ell |$ definido no exemplo 3.17 de fato constitui um funcional linear."

De fato, o funcional linear $\langle \ell |$ do exemplo 3.17 não é um simples caso particular, pois é possível demonstrar que em $V = \mathbb{C}^n$ sobre $\mathbb{C}$ todo funcional linear é da forma acima para algum conjunto $\{\alpha_j \in \mathbb{C},\ 1 \leq j \leq n\}$. Esse resultado é conseqüência de um dos teoremas centrais sobre espaços de Hilbert, conhecido como teorema da representação de Riesz.

3.5 - Espaços Duais na MQ

Seja V um espaço vetorial sobre o corpo dos complexos $\mathbb{C}$. Conforme discutimos nas seções anteriores é possível introduzir uma correspondência injetora entre os elementos de V e de seu dual V'. Note que tal resultado independe da dimensionalidade de V. De fato, se $\dim V < \infty$, podemos ainda afirmar que tal correspondência é sobrejetora. Dada a importância de espaços vetoriais de dimensão infinita na MQ, não faremos neste momento nenhuma hipótese acerca da dimensionalidade de V.

Fixemos uma base de V: $\{|b_i\rangle, i \in I\} \subset V$ e de V': $\{\langle \beta_j|, j \in J\} \subset V'$ onde I, J são conjuntos arbitrários de índices. Logo, a correspondência injetora supracitada garante que para cada elemento $|a\rangle = \sum_{k=1}^{n} a_{i_k} |b_{i_k}\rangle \in V$ existe um único vetor $\langle a| = \sum_{k=1}^{n} \bar{a}_{j_k} \langle \beta_{j_k}| \in V'$. Denominamos, no contexto da MQ, tal mapa injetor de correspondência dual, denotada usualmente da seguinte forma

$$V \ni |a\rangle \xleftrightarrow{C.D.} \langle a| \in V'.$$

A motivação para a conjugação complexa da componente a_{i_k} no processo da correspondência dual advém da discussão sobre a forma dos funcionais lineares de $\mathbb{C}^{n'}$. Veremos posteriormente que tal escolha é importante para a introdução de um produto interno em V.

Naturalmente, podemos considerar a ação da correspondência dual sobre a base de V:

$$B \equiv \{|b_i\rangle \in V, i \in I\} \xleftrightarrow{D.C.} \{\langle b_i| \in V', i \in I\} \equiv \tilde{B}$$

É fácil constatar que $\tilde{\mathcal{B}}$ constitui um conjunto linearmente independente. No entanto, como V não é necessariamente de dimensão finita, em geral, a varredura linear de $\tilde{\mathcal{B}}$ difere de V', $\text{span}(\tilde{\mathcal{B}}) \neq V'$. Assim, podemos sem perda de generalidade considerar que:

$$\tilde{\mathcal{B}} = \{ \langle b_i | \in V', i \in I \} \subseteq \{ \langle \beta_j | \in V', j \in J \} = \mathcal{B}'$$

É usual escolher, assim como fizemos no caso de dimensão finita, que:

$$\langle b_j | b_i \rangle = \delta_{ij} \; , \; \forall \langle b_j | \in \tilde{\mathcal{B}} \; , \; \forall | b_i \rangle \mathcal{B} .$$

3.6 - Produto Interno

Nesta seção recordamos o importante conceito de produto interno e o relacionamos com o conceito de espaço vetorial dual.

Definição 3.19: "Seja V um espaço vetorial sobre o corpo dos números complexos $\mathbb{C}$, um produto interno é uma função $(\_,\_) : V \times V \longrightarrow \mathbb{C}$, que satisfaz as seguintes propriedades. Sejam $|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle \in V$ e $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$:

(1) Linearidade: $(|c\rangle, \alpha|a\rangle + \beta|b\rangle) = \alpha(|c\rangle, |a\rangle) + \beta(|c\rangle, |b\rangle)$;

(2) Conjugação Complexa: $\overline{(|a\rangle, |b\rangle)} = (|b\rangle, |a\rangle)$;

(3) Positividade: $(|a\rangle, |a\rangle) > 0$."

Algumas conseqüências imediatas da definição 3.19 são:

(1) A antilinearidade na primeira variável:

$$(\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle, |c\rangle) = \overline{(|c\rangle, \alpha|a\rangle + \beta|b\rangle)} = \bar{\alpha}\,\overline{(|c\rangle, |a\rangle)} + \bar{\beta}\,\overline{(|c\rangle, |b\rangle)}$$

$$= \bar{\alpha}\,(|a\rangle, |c\rangle) + \bar{\beta}\,(|b\rangle, |c\rangle)$$

(2) $(|0\rangle, |a\rangle) = (|a\rangle, |0\rangle) = 0$

Naturalmente, como $|b\rangle - |b\rangle = |0\rangle$, $\forall\, |b\rangle \in V$, podemos escrever

$$(|a\rangle, |0\rangle) = (|a\rangle, |b\rangle - |b\rangle) = (|a\rangle, |b\rangle) - (|a\rangle, |b\rangle = 0$$

Finalmente,

$$(|0\rangle, |a\rangle) = \overline{(|a\rangle, |0\rangle)} = \bar{0} = 0.$$

(3) O produto interno é positivo definido, $(|a\rangle, |a\rangle) \geqslant 0$ e a igualdade é válida, se e somente se, $|a\rangle = |0\rangle$.

Como veremos adiante a condição de que o produto interno seja positivo definido é essencial para a interpretação probabilística da MQ. Outro resultado de extrema importância é a desigualdade de Cauchy-Schwaz:

Teorema 3.20: "Sejam $|a\rangle, |b\rangle \in V$ então $|(|a\rangle, |b\rangle)|^2 \leqslant |(|a\rangle, |a\rangle)| \cdot |(|b\rangle, |b\rangle)|$."

Sejam V um espaço vetorial sobre $\mathbb{C}$ e V' o seu dual algébrico. Vimos na última seção que existe uma aplicação injetora de $V \rightarrow V'$, que denominamos correspondência dual. Assim, $\forall\, |a\rangle \in V$ somos capazes de associar univocamente um funcional linear $\langle a| \in V'$ tal que $\langle a|b\rangle \in \mathbb{C}$, $\forall\, |b\rangle \in V$. Conseqüentemente, a aplicação:

$$(|a\rangle, |b\rangle) \in V \times V \longmapsto \langle a|b\rangle \in \mathbb{C}$$

define um produto interno em V. Para constatarmos tal fato, devemos verificar as propriedades da definição 3.19.

(1) $(|c\rangle, \alpha|a\rangle + \beta|b\rangle) = \langle c|(\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle) = \alpha\langle c|a\rangle + \beta\langle c|b\rangle$

$= \alpha(|c\rangle, |a\rangle) + \beta(|c\rangle, |b\rangle)$;

(2) $\overline{(|a\rangle, |c\rangle)} = \overline{\langle a|c\rangle} = \overline{\left(\sum_{k=1}^{n} \bar{a}_{i_k}\langle b_{i_k}|\right)\left(\sum_{j=1}^{m} c_{i_j}|b_{i_j}\rangle\right)} = \sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{n} \bar{c}_{i_j} a_{i_k} \langle b_{i_k}|b_{i_j}\rangle$

$= \sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{n} \bar{c}_{i_j} a_{i_k} \delta_{i_k i_j} = \sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{n} \bar{c}_{i_j} a_{i_k} \delta_{i_j i_k} = \sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{n} \bar{c}_{i_j} a_{i_k} \langle b_{i_j}|b_{i_k}\rangle$

$= \left(\sum_{j=1}^{m} \bar{c}_{i_j}\langle b_{i_j}|\right)\left(\sum_{k=1}^{n} a_{i_k}|b_{i_k}\rangle\right) = \langle c|a\rangle = (|c\rangle, |a\rangle)$;

(3) $(|a\rangle, |a\rangle) = \langle a|a\rangle = \left(\sum_{k=1}^{n} \bar{a}_k\langle b_k|\right)\left(\sum_{j=1}^{n} a_j|b_j\rangle\right) = \sum_{j,k=1}^{n} \bar{a}_k a_j \langle b_k|b_j\rangle = \sum_{j,k=1}^{n} \bar{a}_k a_j \delta_{kj}$

$= \sum_{j=1}^{n} \bar{a}_j a_j = \sum_{j=1}^{n} |a_j|^2 > 0$.

onde empregamos a decomposição dos vetores de V e V' em termos de B e B', restringindo-nos aos n ou m elementos de B e B' necessários para expressarmos $|a\rangle \in V$ e $\langle c| \in V'$ desde que $|c\rangle \in V$.

Portanto, a correspondência dual entre V e V', que associa a cada elemento da base $B = \{|b_i\rangle \in V, i \in I\}$ de V um único elemento do subconjunto da base B', $\tilde{B} = \{\langle b_i| \in V', i \in I\}$, do dual de V, V', tal que $\langle b_j|b_i\rangle = \delta_{ij}$, $\langle b_j| \in \tilde{B} \subseteq B'$, $|b_i\rangle \in B$, induz um produto interno em V. De sorte que se

$$|a\rangle = \sum_{k\in K} a_k|b_k\rangle, \quad |c\rangle = \sum_{j\in J} c_j|b_j\rangle \in V. \quad K, J \subset I$$

então o produto interno entre tais vetores é dado por:

$$(|a\rangle, |c\rangle) = \langle a|c\rangle = \sum_{i\in K\cap J} \bar{a}_i c_i .$$

Note que no caso de dimensão finita a expressão acima se reduz a:

$$(|a\rangle, |c\rangle) = \langle a|c\rangle = \sum_{i=1}^{n} \bar{a}_i c_i , \text{ onde } n = \dim V.$$

Em particular para os elementos da base B temos que:

$$(|b_i\rangle, |b_j\rangle) = \langle b_i | b_j \rangle = \delta_{ij}, \ \forall i,j \in I.$$

Consequentemente, a base $\mathcal{B}$ é ortonormal. De uma forma mais geral dizemos que dois vetores $|a\rangle, |b\rangle \in V$ são ortogonais se

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

3.7 - Normas e Métricas

Um outro conceito importante é o de norma que definimos a seguir:

Definição 3.21: "Seja um espaço vetorial V sobre um corpo $\mathbb{K}$, uma norma em V é uma função $\| \_ \| : V \longrightarrow \mathbb{R}$ que satisfaz as seguintes propriedades:

(1) Positividade definida: $\forall |a\rangle \in V$, $\| |a\rangle \| \geqslant 0$. Ademais, $\| |a\rangle \| = 0$, se e somente se, $|a\rangle = |0\rangle$,

(2) Homogeneidade: $\| \alpha |a\rangle \| = |\alpha| \, \| |a\rangle \|$, $\forall \alpha \in \mathbb{K}, \forall |a\rangle \in V$,

(3) Desigualdade Triangular: $\forall |a\rangle, |b\rangle \in V$

$$\| |a\rangle + |b\rangle \| \leqslant \| |a\rangle \| + \| |b\rangle \|.$$ "

Em particular, se V for um espaço vetorial sobre o corpo dos complexos dotado de um produto interno sempre é possível definir uma norma em V por:

$$\| |a\rangle \| = \sqrt{(|a\rangle, |a\rangle)} = \sqrt{\langle a | a \rangle}, \ \forall |a\rangle \in V.$$

Exercício 3.22: " Mostre que $\sqrt{\langle a | a \rangle}$, $\forall |a\rangle \in V$ de fato define uma norma. "

Tal norma é denominada a norma induzida pelo produto escalar $\langle \cdot | \cdot \rangle$.

Qualquer norma, em particular a induzida por um produto interno, introduz no espaço vetorial V uma noção de distância entre dois vetores quaisquer $|a\rangle, |b\rangle \in V$

$$d(|a\rangle, |b\rangle) = \| |a\rangle - |b\rangle \| = \sqrt{(\langle a| - \langle b|)(|a\rangle - |b\rangle)}$$
$$= (\langle a|a\rangle - \langle a|b\rangle - \langle b|a\rangle + \langle b|b\rangle)^{1/2}$$

que trivialmente satisfaz as seguintes propriedades:

(1) Positividade definida: $d(|a\rangle, |b\rangle) \geq 0$, $\forall\, |a\rangle, |b\rangle \in V$. Ademais,
$d(|a\rangle, |b\rangle) = 0$, se e somente se, $|a\rangle = |b\rangle$;

(2) Simetria: $d(|a\rangle, |b\rangle) = d(|b\rangle, |a\rangle)$, $\forall\, |a\rangle, |b\rangle \in V$;

(3) Desigualdade triangular: $d(|a\rangle, |b\rangle) \leq d(|a\rangle, |c\rangle) + d(|b\rangle, |c\rangle)$
$\forall\, |a\rangle, |b\rangle, |c\rangle \in V$.

Exercício 3.23: "Verifique as propriedades acima."

Com isso chegamos na importante definição de métrica.

Definição 3.24: "Seja V um espaço vetorial sobre o corpo $\mathbb{K}$, uma função $d: V \times V \to \mathbb{R}$ que satisfaz as propriedade (1)-(3) acima é denominada uma métrica. Em particular o par (V, d) é denominado um espaço métrico."

3.8 - Convergência e Completeza

Nesta seção vamos estender a noção fundamental de convergência, usualmente estudada no contexto da reta real para espaços métricos em geral.

Iniciamos recordando a noção de seqüência:

Definição 3.25: "Seja X um conjunto não-vazio, uma função $a: \mathbb{N} \to X$

é denominada uma seqüência e denotada por: $\{a_n \in X, n \in \mathbb{N}\}$."

Com isso podemos formular o conceito de convergência de seqüências:

Definição 3.26: "Seja (X, d) um espaço métrico. Dizemos que uma seqüência $\{a_n \in X, n \in \mathbb{N}\}$ converge para um elemento $a \in X$ com respeito à métrica d se para todo $\varepsilon > 0$ existir um número natural $N(\varepsilon)$ tal que $d(a, a_n) < \varepsilon$, $\forall n > N(\varepsilon)$."

Um resultado imediato, porém de extrema importância é que se uma seqüência for convergente ela só pode convergir a um ponto.

Outro conceito central na discussão da convergência de seqüências é o de seqüência de Cauchy:

Definição 3.27: "Seja (X, d) um espaço métrico, uma seqüência $\{a_n \in X, n \in \mathbb{N}\}$ é dita uma seqüência de Cauchy com relação à métrica d se para todo $\varepsilon > 0$, existir um número natural $N(\varepsilon)$ tal que $d(a_i, a_j) < \varepsilon$, $\forall i, j > N(\varepsilon)$."

O resultado seguinte norteará toda a nossa futura discussão:

Teorema 3.28: "Seja (X, d) um espaço métrico e considere uma seqüência $\{a_n \in X, n \in \mathbb{N}\}$ convergente com relação à métrica d a um elemento $a \in X$, i.e., $a_n \xrightarrow{d} a$, então $\{a_n\}$ é uma seqüência de Cauchy com relação à métrica d."

Naturalmente, deveríamos nos indagar se a recíproca do teorema 3.28 é válida, ou seja, "Será que toda seqüência de Cauchy em um espaço métrico é convergente?"

A relevância de tal questão na presente discussão é enorme. Para compreendê-la, considere a seguinte situação. Dada uma seqüência concreta $\{a_n \in X, n \in \mathbb{N}\}$ de um espaço métrico (X, d) a única forma que dispomos para verificar a sua convergência consiste em encontrar um elemento $a \in X$ que satisfaça a definição 3.26. Nem sempre é uma tarefa simples encontrar tal valor a. Seria, pois, muito conveniente se dispuséssemos de um critério de convergência que dependesse unicamente de propriedades intrínsecas da seqüência, tal como o fato de ela ser, ou não, de Cauchy. Posto que para verificar se uma dada seqüência $\{a_n \in X, n \in \mathbb{N}\}$ é de Cauchy, precisamos apenas comparar dois elementos próximos, por exemplo, $d(a_i, a_{i+1})$ para $i > N(\varepsilon)$.

Contudo, tal não é o caso. Existem espaços métricos nos quais há sequências de Cauchy que não convergem. Consideremos um exemplo simples.

Exemplo 3.29: "Considere o espaço métrico constituído pelos números racionais $\mathbb{Q}$ dotados da métrica usual $d(p,q) = |p-q|$. A seqüência $\{s_n \in \mathbb{Q}, n \in \mathbb{N}\}$ com

$$s_n = \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{k!}$$

é uma seqüência de Cauchy, que converge ao número real e. Contudo, $e \notin \mathbb{Q}$. Logo, apesar de $\{s_n \in \mathbb{Q}, n \in \mathbb{N}\}$ ser uma seqüência de Cauchy em $(\mathbb{Q}, d)$ ela não converge em $\mathbb{Q}$ com respeito à métrica d."

Exercício 3.30: "Demonstre que a seqüência $\{s_n \in \mathbb{Q},\ n \in \mathbb{N}\}$ do exemplo 3.29 é de Cauchy e prove que ela não converge a um número racional." (difícil)

O conceito de espaço métrico completo surge da necessidade de contornar tal problema.

Definição 3.31: "Dizemos que um espaço métrico (X, d) é completo com relação à métrica d, se toda seqüência de Cauchy convergir a um elemento de X."

Conseqüentemente, em um espaço métrico completo, para decidirmos se uma dada seqüência converge, basta verificarmos se ela é de Cauchy; sem a necessidade de adivinharmos o seu limite. Fica claro pelo exemplo 3.29 que $\mathbb{Q}$ não constitui um espaço métrico completo com respeito à métrica usual. Entretanto, tanto $\mathbb{R}$ quanto $\mathbb{C}$ são exemplos de espaços métricos completos.

3.9- Espaços de Hilbert

Seja V um espaço vetorial dotado de um produto interno $\langle \cdot | \cdot \rangle$. Conforme discutimos na seção 3.8, podemos, a partir deste produto interno introduzir uma norma em V por $\| |a\rangle \| = \sqrt{\langle a | a \rangle}$, $\forall\, |a\rangle \in V$. Ademais, sabemos que tal norma induz a seguinte métrica em V, $d(|a\rangle, |b\rangle) = \| |a\rangle - |b\rangle \|$, $\forall\, |a\rangle, |b\rangle \in V$. Portanto, o par (V, d) assim construído constitui um espaço métrico. Podemos finalmente definir o conceito de espaço de Hilbert.

Definição 3.32: "Um espaço vetorial $\mathcal{H}$ é denominado um espaço de Hilbert em relação a um produto interno nele definido, se for um espaço métrico completo em relação à métrica induzida por tal produto interno."