Aula 8 Fundamentos da MQ

→ Estrutura Matemática

⇒ Revisão rápida

$$\hat{H}\,\psi_n(x) = E_n\,\psi_n(x)$$

Operador; "estado"; Autovalor; Autoestado (Autofunção)

↳ Autofunções satisfazem $\int \psi_n^*(x)\,\psi_m(x)\,dx = \delta_{nm}$ (ortonormais)

Possível expandir:

$$\Psi(x) = \sum_n^N c_n\,\psi_n(x)$$

$$c_n = \int \psi_n^*(x)\,\Psi(x)\,dx \Rightarrow c_n \in \mathbb{C}$$

↑ # complexo

$$\sum_n |c_n|^2 = 1$$

⇒ Observáveis físicos são representados por operadores $\hat{A}, \hat{B}$ ⇒ $\langle A \rangle = \int \Psi^*(x)\,A\,\Psi(x)\,dx$

$$\begin{cases} \hat{A}\,\psi_n(x) = a_n\,\psi_n(x) \\ \hat{B}\,\psi_n(x) = b_n\,\psi_n(x) \end{cases}$$

⇒ Levar a estruturas matemáticas do tipo Espaço vetorial (espaço de estados)

⇒ Espaços Vetoriais

⇒ Exemplo familiar: vetores em $\mathbb{R}^3$

$$\vec{A} = A_x\hat{x} + A_y\hat{y} + A_z\hat{z} \qquad \{\hat{x},\hat{y},\hat{z}\} \text{ cartesiana}$$

$$\vec{A} = (A_x, A_y, A_z)$$

$$\vec{A} = (A_r, A_\theta, A_\varphi) \qquad \{\hat{r},\hat{\theta},\hat{\varphi}\} \text{ esféricas}$$

$$\Rightarrow \vec{C} = \vec{A} \pm \vec{B} = (A_x \pm B_x)\hat{x} + (A_y \pm B_y)\hat{y} + (A_z \pm B_z)\hat{z}$$

$$\Rightarrow a\vec{A} = a(A_x, A_y, A_z) = aA_x\hat{x} + aA_y\hat{y} + \dots$$

$$\hat{x}\cdot\hat{x} = \hat{y}\cdot\hat{y} = \hat{z}\cdot\hat{z} = 1$$
$$\hat{x}\cdot\hat{y} = \hat{y}\cdot\hat{z} = \hat{z}\cdot\hat{x} = 0$$

Produto interno

$$\Rightarrow \vec{A}\cdot\vec{B} = A_xB_x + A_yB_y + A_zB_z$$

$$\vec{A}\cdot\vec{A} \Rightarrow |A|^2 \Rightarrow A = \sqrt{\vec{A}\cdot\vec{A}}$$
$$|A| = A = \sqrt{A_x^2 + A_y^2 + A_z^2}$$

⇒ Definição de Espaço vetorial

Definição 1:

→ Grupo comutativo $\mathbb{V}$, com multiplic p/ escalar definida sobre um campo complexo $\mathbb{F}$, satisfazendo prop. Assoc. e distributivas.

$$\Rightarrow \mathbb{V} = \{\underbrace{\vec{u}, \vec{v}, \vec{w}, \dots}_{\text{vetores}}\}$$
$$\Rightarrow \mathbb{F} = \{\underbrace{\lambda, \mu, \dots}_{\text{escalares}}\}$$

$$\Rightarrow \lambda(\mu\vec{u}) = (\lambda\mu)\vec{u}$$
$$\lambda(\vec{v}+\vec{u}) = \lambda\vec{u} + \lambda\vec{v}$$
$$(\lambda+\mu)\vec{w} = \lambda\vec{w} + \mu\vec{w}$$

Campos

- $\mathbb{F} = \{\lambda, \mu, \dots\} \in \mathbb{C}$
- 2 operações: $+, \times$ (Adição & Multiplic.)
- $\langle \mathbb{F}, + \rangle \rightarrow$ grupo comutativo
- $\langle \mathbb{F}, \times \rangle \rightarrow$ " " excluindo elem. nulo
- distributivo $\qquad \lambda + (-\lambda) = 0$

$$\lambda \times (\mu + \kappa) = \lambda\times\mu + \lambda\times\kappa$$

Grupo? ⇒ Grupo:

- $G = \{x, y, z \dots\}$
- operação: $+, \cdot, *$ (Adição, multiplic., op. genérica)
- inverso: x^{-1}, $\forall x \in G \Rightarrow$ $x * x^{-1} = e$
- identidade: e → $x * e = x$

Exemplo 1: $* \equiv +$ (soma)

$$x + (-x) = e = 0$$

$$x + 0 = x$$

Exemplo 2: $* \equiv \times$ (multiplic.)

$$x \times (x^{-1}) = e \overset{?}{=}$$

$$2 \times \left(\tfrac{1}{2}\right) = 1$$

$$2 \cdot e = 2 \rightarrow e = 1$$

⇒ • Fechado: $\forall x, y \in G \rightarrow x * y \in G$

• Associativo: $\forall x, y, z \in G \rightarrow (x*y)*z = x*(y*z)$

⇒ Grupo comutativo $\quad x*y = y*x$

⇒ Definição 2:

conjunto $\mathbb{V} \neq \emptyset$ (ñ vazio) de elementos, chamados vetores, que é fechado com relação à adição (+) e multiplic. por escalar de um campo complexo $\mathbb{F}$.

$$\left.\begin{array}{l} \mathbb{V} = \{\vec{u}, \vec{v}, \vec{w}, \dots\} \\ \mathbb{F} = \{\lambda, \mu, \kappa, \dots\} \end{array}\right\} \Rightarrow \forall\, \vec{u}, \vec{w} \in \mathbb{V} \text{ e } \forall\, \lambda, \mu \in \mathbb{F} \rightarrow \underbrace{\lambda\vec{u} + \mu\vec{w}}_{} \in \mathbb{V}$$

$$\lambda(\vec{u} + \vec{v}) = \lambda\vec{u} + \lambda\vec{v}$$

Grupos → Anéis → Campos → Espaços vetoriais → Modelos

*Os espaços vetoriais usados na MQ tem uma estrutura extra p/ satisfazer prop. físicas

Espaços de Hilbert ⇒ $\mathcal{H} = \{\psi(x), \phi(x), \dots\}$

$$\psi(x) \rightsquigarrow \boxed{\int \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx < \infty}$$

menor que infinito

espaço das funções normalizáveis ("quadro-integráveis")

$$\mathcal{H} = \{\psi, \phi, \dots\}$$

Produto interno

$$\forall\, \psi, \phi \in \mathcal{H} \rightarrow (\phi, \psi) = \underbrace{\int \phi^*(x)\,\psi(x)\,dx}_{\in \mathbb{C}} = 0$$

1

$\in \mathbb{C}$ ~ pertence aos números complexos

$$\left\{\begin{array}{l} (\phi, \psi) = \text{número complexo} \\ (\phi, \psi) = (\psi, \phi)^* \\ (\phi, c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(\phi, \psi_1) + c_2(\phi, \psi_2) \\ (c_1\psi_1 + c_2\psi_2, \phi) = c_1^*(\psi_1, \phi) + c_2^*(\psi_2, \phi) \end{array}\right.$$

$$\Rightarrow (\phi, \phi) \geq 0 \quad : \in \mathbb{R}$$

$= 0$ se $\phi = 0$

$$\Downarrow$$

$$\|\phi\| = \int \phi^*(x) \cdot \phi(x)\,dx$$

Linearmente independente

$$\sum_{n=1}^{d} c_n \psi_n = 0$$

Apenas se: $c_n = 0$ ("solução trivial")

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$

$\{\psi_1, \psi_2, \dots \psi_n\}$

$$\int \underbrace{\psi_n^*(x)\,\psi_m(x)}_{} = \delta_{nm}$$