Uma Breve Introdução à Matemática da Mecânica Quântica

Textuniversitários 18

Artur O. Lopes

Uma Breve Introdução à Matemática *da Mecânica Quântica*

Editora Livraria da Física
São Paulo — 2022

1a. Edição

Editor: José Roberto Marinho
Projeto gráfico e diagramação: Thiago Augusto Silva Dourado
Capa: Fabrício Ribeiro

Texto em conformidade com as novas regras ortográficas do Acordo da Língua Portuguesa.

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
(Câmara Brasileira do Livro, SP, Brasil)

Lopes, Artur O.
Uma breve introdução à matemática da mecânica quântica / Artur O. Lopes. – 2. ed. – São Paulo : Livraria da Física, 2022. – (Série textuniversitários ; 18)

Bibliografia.
ISBN 978-65-5563-259-0

1. Matemática 2. Mecânica quântica I. Título. II. Série.

22-127871 CDD-530.12

Índices para catálogo sistemático:

1. Mecânica quântica : Física 530.12

Cibele Maria Dias - Bibliotecária - CRB-8/9427

ISBN 978-65-5563-259-0

Impresso no Brasil
Printed in Brazil

Editora Livraria da Física
Tel./Fax: +55 11 3459-4327 / 3936-3413
www.livrariadafisica.com.br

Prefácio da Segunda Edição

Nesta nova edição apenas adicionamos algumas novas referências e o texto se manteve basicamente o mesmo. Observamos ao leitor que pode ser encontrado no Youtube uma sequência de cinco aulas, onde o Prof. Alexandre Baraviera apresenta parte do material do presente texto, gravado quando do curso presencial oferecido no Colóquio Brasileiro de Matemática de 2017. Um número expressivo de pessoas assistiram a totalidade, ou parte destas aulas disponíveis on line.

Artur O. Lopes
Porto Alegre — RS,
25 de julho 2022

Prefácio da Primeira Edição

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Desejo agradecer a vários colegas com quem tive o prazer de discutir questões relativas ao presente texto: Ph. Thieullen, A. Baraviera, S. Prado, M. Terra Cunha, M. Disconzi, M. Sebastiani, C. F. Lardizabal, J. Mengue, J. Mohr, R. Souza, R. Bissacot, L. Ciolleti, R. Exel. Agradeço

sobremaneira aos estudantes que assistiram a três edições do curso de Mecânica Quântica que ministrei no Inst. Mat. da UFRGS: Carlos Scarinci, Gilles Castro, Vilarbo Junior, Alvaro Kruger Ramos, Douglas dos Santos, Eduardo Fischer, Fagner Rodrigues, Mirian Telichevesky, Otavio Menezes, Patricia Klaser, Rangel Baldasso, Thomas Bartlett, Felipe Guarnieri, Jader Brasil, Josué Knorst, Luísa Borsato e Newton Loebens. Eles participaram da elaboração de diversas partes do presente texto. As eventuais incorreções, naturalmente, devem ser atribuídas ao autor. Alguns textos que recomendamos como leitura básica suplementar e que, de alguma forma, influenciaram a redação do presente livro são:

1. S. Gustafson; I. Sigal, *Mathematical concepts of Quantum Mechanics*, Springer Verlag.

2. K. Hannabuss, *An introduction to Quantum Theory*, Oxford Press.

Artur O. Lopes
Porto Alegre — RS,
7 de maio de 2017

Sumário

1

Alguns Pré-requisitos

Vamos inicialmente considerar alguns resultados e propriedades básicas dos espaços vetoriais de dimensão infinita (sobre o corpo dos números complexos) com produto interno. O caso em que o espaço vetorial tem dimensão finita é tratado com bastante detalhe na seção 21 de [196].

Referimos o leitor a [266] ou [241] para um aprofundamento dos diversos resultados e conceitos que vez por outra serão usados nesta seção.

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

Se $u = a + bi$ e $v = c + di$ então

$$u\,v = (a+b\,i)\,(c+d\,i) = a\,c+a\,di+bci+b\,d\,i^{\,2} = (ac-bd)+(ad+bc)\,i.$$

Todo número complexo $a + bi$ se escreve como

$$a\ +\ b\,i = \alpha\,e^{\beta\,i} = \alpha\ \ (\cos(\beta)\ +\ i\ \mathrm{sen}(\beta)),$$

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

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

$\overline{z} = (a\, -\, b\, i)$ denota o complexo conjugado de $z = a + b\, i$.

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

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

Observe que $\overline{z_1\, +\, z_2} = \overline{z_1} + \overline{z_2}$ e $\overline{z_1\; z_2} = \overline{z_1}\,\overline{z_2}$.

Vamos considerar aqui prioritariamente espaços vetoriais E sobre o corpo dos escalares complexos (ver seção 21 em [196] para definição exata). Assim, se $v_1, v_2 \in E$, e $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}$, então está bem definido $\alpha_1\, v_1 + \alpha_2\, v_2 \in E$.

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

1) $< u, v > = \overline{< v, u >}$;

2) $< u + u', v > = < u, v > \; + \; < u', v >$;

3) $< \lambda\, u, v > = \lambda \; < u, v >$;

4) $< u, u > > \; 0$, se $u \neq 0$.

Para mais detalhes recomendamos o leitor para a seção 21 em [196].

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

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

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

Dado um produto interno $<,>$ sobre um espaço vetorial E podemos definir a norma associada através de

$$|v| = \sqrt{< v, v >}.$$

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

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

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

Uma propriedade importante é a desigualdade de Cauchy-Schwarz (ver prova em [196] ou [197]) que diz que dados $v_1, v_2 \in E$, então

$$|<v_1, v_2>| \leq |v_1|\,|v_2|,$$

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

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

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

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

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

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

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

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

$$|v| = \sqrt{< v, v >},$$

para cada vetor em $\mathcal{H}$, será chamado de espaço de Hilbert se ele for completo para tal norma (ver [174] [70] [307] para mais detalhes).

O exemplo mais simples de espaço de Hilbert é o conjunto dos números complexos $\mathbb{C}$ com o produto interno $< u, v >= u\,\overline{v}$, onde $\overline{z}$ denota o complexo conjugado de z. Mais exatamente, se $u = a + bi$ e $v = c + di$, então, $u\,\overline{v} = (a + bi)\,(c - di)$. Neste caso, $|z| = \sqrt{x^2 + y^2}$, se $z = x + y\,i$.

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

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

$$< u, z > \; = \; u_1\,\overline{z_1} + u_2\,\overline{z_2} + \cdots + u_n\,\overline{z_n}.$$

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

$$< \, u, \, \lambda\, v > = \; \overline{\lambda} < u, v >$$

e

$$< \lambda\, u, \, v > = \; \lambda < u, v > .$$

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

Algumas vezes usamos também a notação $< x|y >$ em vez da expressão $< x, y >$.

Note que $< u, v > = < u|v > = \overline{< v|u >} = \overline{< v, u >}$.

As vezes se diz que $< u|v >$ é o "braket" do vetor u com o vetor v.

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

1) $|\psi_n| = 1$, $\forall n \in \mathbb{N}$,

2) $< \psi_n, \psi_m >= 0$, $\forall m \neq n$,

3) para qualquer ψ existe uma escolha $\alpha_n \in \mathbb{C}$, $n \in \mathbb{N}$, tal que

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

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

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

O limite acima será descrito pela expressão formal

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

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

$$|\psi| = \sqrt{\sum_n |\alpha_n|^2} = \sqrt{\sum_n | < \psi_n|\psi > |^2}.$$

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

Os exemplos de espaços de Hilbert que consideraremos usualmente são

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

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

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

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

$$< \phi, \psi >= \int \phi(x) \, \overline{\psi(x)} \, dx.$$

Neste caso, $|\phi| = \sqrt{\int |\phi(x)|^2 \, dx} = \sqrt{< \phi, \phi >}$ define uma norma que o torna um espaço de Hilbert. Note que uma função ψ neste espaço esta definida a menos de um conjunto de medida de Lebesgue zero [110]. Dizer que duas funções ϕ, ψ estão ϵ próximas significa que

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

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

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

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

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

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

Este espaço também é de Hilbert e tem dimensão infinita.

3) Seja M uma variedade diferenciável de dimensão n e uma forma volume dx (ver [199] ou [187] para definição e propriedades). Denote também por dx sua extensão a uma medida de Lebesgue em M. Então consideraremos $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(M)(dx)$. Para $\phi : M \to \mathbb{C}$, e $\psi : M \to \mathbb{C}$, tais que, $\int_M |\phi|^2(x)dx < \infty$, $\int_M |\psi|^2(x)dx < \infty$, nós definimos $< \phi, \psi >= \int_M \phi(x)\, \overline{\psi(x)}\, dx$. Neste caso $|\phi| = \sqrt{\int_M |\phi(x)|^2\, dx}$.

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

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

$$< \lambda\, \phi, \psi > = \lambda < \phi, \psi >$$

e

$$< \phi, \lambda\, \psi > = \overline{\lambda} < \phi, \psi > .$$

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

$$< v_1, v > = < v_2, v >,$$

ou, de forma equivalente se vale que

$$< v_1 - v_2, v > = 0,$$

então $v_1 = v_2$.

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

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

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

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

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

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

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

Note que para qualquer operador linear $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ vale que $A \, I = A = I \, A$.

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

Dado o operador linear $L : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$, dizemos que o operador linear $G : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_1$, é o inverso de L se $G \circ L = I = L \circ G$. De forma um pouco mais precisa: $G \circ L = I_1$ onde I_1 é o operador identidade em $\mathcal{H}_1$, e $L \circ G = I_2$ onde I_2 é o operador identidade em $\mathcal{H}_2$.

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

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