19: A notação de Dirac

Neste nosso tratamento elementar de mecânica quântica, consideraremos o simbolismo introduzido por Dirac, que tem um significado matemático não-trivial, como uma notação. Para fazer total justiça ao método, o leitor faria bem em consultar a obra original de Dirac [1] . Para uma apresentação mais adaptada à linguagem matemática contemporânea, veja [2].

Um vetor do espaço dos estados é descrito por um símbolo $|\,\rangle$, que se pronuncia *ket* . Um elemento do dual desse espaço é denotado por $\langle\,|$, e denominado bra. O produto escalar dos estados $|a\rangle$ e $|b\rangle$ é denotado por $\langle b|a\rangle$, e se trata de um *bra(c)ket* , justificando os nomes.

Seja $\hat{O}$ um operador. Denotaremos por $|o\rangle$ seus autoestados, de modo que

$$\hat{O}|o\rangle = o|o\rangle$$

onde os números o são os autovalores.

Os autoestados do operador de posição

$$\hat{\vec{x}} = \hat{x}\vec{i} + \hat{y}\vec{j} + \hat{z}\vec{k}$$

são denotados por $|\vec{x}\rangle$. O símbolo $\langle\vec{x}|o\rangle$ descreve o estado $|o\rangle$ na *representação das coordenadas*:

$$\langle\vec{x}|o\rangle = \psi_o(\vec{x})$$

Alguns exemplos:

O hamiltoniano $\hat{H}$ tem seus autoestados, $|n\rangle$, e autovalores , E_n, ligados pela relação

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

A condição de ortonormalidade desses autoestados é escrita

$$\langle n'|n\rangle = \delta_{nn'}$$

Os autoestados comuns a $\hat{\vec{l}}^2$ e $\hat{l}_z$ são denotados por $|lm\rangle$, e as seguintes equações são satisfeitas:

$$\begin{aligned}\hat{\vec{l}}^2|lm\rangle &= l(l+1)|lm\rangle \\ \hat{l}_z|lm\rangle &= m|lm\rangle\end{aligned}$$

Seja uma base do espaço dos estados formada pelos *kets* $|n\rangle$, $|n'\rangle$, $|n''\rangle$, etc. e seja $\hat{O}$ um operador. Então, os elementos de matriz de $\hat{O}$ nessa base serão os números complexos

$$\langle n'|\hat{O}|n\rangle$$

Note-se que:

$$\begin{aligned}\langle a|b\rangle &= (\langle b|a\rangle)^* \\ \langle a|\hat{O}|b\rangle &= (\langle b|\hat{O}^+|a\rangle)^*\end{aligned}$$

Muito importante na notação de Dirac é uma classe de operadores que se escrevem assim:

$$|a\rangle\langle b|$$

e são definidos pela sua ação sobre um *kets* arbitrário $|\ \rangle$:

$$|a\rangle\langle b|(|\ \rangle) = \langle b|\ \rangle|a\rangle$$

Sejam $|n\rangle$ autoestados de um operador hermiteano. Então, a *relação de completude* se escreve

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}$$

Quando o espectro é contínuo, por exemplo, no caso do operador de posição, a soma é substituída por uma integral:

$$\int d\vec{x}\ \ |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}| = \hat{1}$$

O principal uso dessas representações do operador $\hat{1}$ é o seguinte: seja $\langle n|n'\rangle$ um produto escalar. Então,

$$\langle n|n'\rangle = \langle n|\hat{1}|n'\rangle = \langle n|\left(\int d\vec{x}|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\right)|n'\rangle$$

e, como $\langle\vec{x}|n\rangle = \psi_n(\vec{x})$,

$$\langle n|n'\rangle = \int d\vec{x}\psi_n^*(\vec{x})\psi_{n'}(\vec{x})$$

mostrando que efetivamente se trata do produto escalar anteriormente introduzido. Considere os operadores $\hat{A}$ e $\hat{B}$ e o seu produto, $\hat{A}\hat{B}$. Seja $|n\rangle$ uma base. Os elementos de matriz do operador produto nessa base são

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{A}\hat{B}|n'\rangle &= \langle n|\hat{A}\left(\sum_{n''}|n''\rangle\langle n''|\right)\hat{B}|n'\rangle \\ &= \sum_{n''}\langle n|\hat{A}|n''\rangle\langle n''|\hat{B}|n'\rangle\end{aligned}$$

que exibe a expressão correta para o produto clássico de matrizes.

Seja $|n\rangle$ um estado qualquer. Sua função de onda na representação das coordenadas é, como vimos,

$$\psi_n(\vec{x}) = \langle\vec{x}|n\rangle$$

Sejam $|\vec{p}\rangle$ os autoestados do momento, e

$$\int d\vec{p}\ \ |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| = \hat{1}$$

sua relação de completude. Então, a função de onda de $|n\rangle$ na representação do momento é

$$\langle\vec{p}|n\rangle = \int d\vec{x}\langle\vec{p}|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|n\rangle$$

Que pode ser escrita

$$\psi_n(\vec{p}) = \int d\vec{x}\ \langle\vec{p}|\vec{x}\rangle\ \psi_n(\vec{x})$$

Daqui, por comparação com um resultado anterior pode-se inferir que

$$\langle\vec{p}|\vec{x}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}.\vec{x}\right) \tag{382}$$

Uma dedução direta deste resultado é a seguinte:

$$\begin{aligned}\langle p|\hat{p}|x\rangle &= p\langle p|x\rangle \\ &= -i\hbar\frac{d}{dx}\langle p|x\rangle\end{aligned}$$

Igualando os dois segundos membros, temos

$$-i\hbar\frac{d}{dx}\ \langle p|x\rangle = p\langle p|x\rangle$$

ou

$$\frac{d\ \langle p|x\rangle}{\langle p|x\rangle} = \frac{i}{\hbar}pdx$$

de onde segue que

$$\langle p|x\rangle = Ae^{\frac{i}{\hbar}px}$$

Para determinar A, note-se que

$$\langle p|x\rangle\langle x|p'\rangle = |A|^2 \exp\left(\frac{i}{\hbar}(p-p')x\right)$$

e, integrando em x,

$$\int dx\langle p|x\rangle\langle x|p'\rangle = |A|^2 \int dx \exp\left(\frac{i}{\hbar}(p-p')x\right)$$

Mas

$$\int dx\langle p|x\rangle\langle x|p'\rangle = \langle p|p'\rangle = \delta(p-p')$$

Logo,

$$\delta(p-p') = |A|^2 2\pi\delta(\frac{p}{\hbar} - \frac{p'}{\hbar}) = |A|^2 2\pi\hbar\delta(p-p')$$

Logo,

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

e

$$\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

que é a versão unidimensional da Eq.(383).