Operador diferencial adjunto

Vamos considerar um operador diferencial qualquer $\mathcal{D}$. Definimos seu operador diferencial adjunto, denotado por $\mathcal{D}^\dagger$, como aquele operador que satisfaz esta propriedade:

$$\int_a^b dx\, f^*(x)\left[\mathcal{D}g(x)\right] = \int_a^b dx\, \left[\mathcal{D}^\dagger f(x)\right]^* g(x) + F(b,a)\,,$$

onde $F(b,a)$ é uma função que só depende dos extremos do intervalo, conhecida como "termos de fronteira".

Operador auto-adjunto

Quando o operador adjunto $\mathcal{D}^\dagger$ for igual ao próprio operador $\mathcal{D}$, então só há um único operador $\mathcal{D}^\dagger = \mathcal{D}$ e, neste caso, este operador é dito ser auto-adjunto. Neste caso, a propriedade acima fica:

$$\int_a^b dx\, f^*(x)\left[\mathcal{D}g(x)\right] = \int_a^b dx\, \left[\mathcal{D}f(x)\right]^* g(x) + F(b,a)\,.$$

Operador hermitiano

Quando, dependendo das condições de contorno do problema ou mesmo das propriedades do próprio operador auto-adjunto $\mathcal{L}$, quando $F(b,a) = 0$, então este operador auto-adjunto é chamado de operador hermitiano, satisfazendo a seguinte propriedade:

$$\int_a^b dx\, f^*(x)\left[\mathcal{L}g(x)\right] = \int_a^b dx\, \left[\mathcal{L}f(x)\right]^* g(x)\,.$$

A seguir, neste curso, estudaremos as propriedades de operadores hermitianos por serem muito importantes, principalmente, no contexto da mecânica quântica.

O livro-texto do Riley et al mostra como exemplo que o operador d^2/dx^2 é auto-adjunto e também mostra a condição para que $F(b,a)$ seja nula, onde $a = t_0$ e $b = t_0 + T$. Vamos fazer esta análise aqui. Então, neste caso, temos que calcular:

$$\begin{aligned}
\int_a^b dx\, \left[\mathcal{L}f(x)\right]^* g(x) &= \int_{t_0}^{t_0+T} dx\, \left[\frac{d^2}{dx^2}f(x)\right]^* g(x) \\
&= \int_{t_0}^{t_0+T} dx\, \left[\frac{d^2}{dx^2}f^*(x)\right] g(x) \\
&= \int_{t_0}^{t_0+T} dx\, g(x)\,\frac{d}{dx}\left[\frac{d}{dx}f^*(x)\right] \\
&= \int_{t_0}^{t_0+T} dx\, \left\{\frac{d}{dx}\left[g(x)\,\frac{d}{dx}f^*(x)\right] - \left[\frac{d}{dx}g(x)\right]\left[\frac{d}{dx}f^*(x)\right]\right\} \\
&= \left[g(x)\,\frac{d}{dx}f^*(x)\right]_{t_0}^{t_0+T} - \int_{t_0}^{t_0+T} dx\, \left[\frac{d}{dx}g(x)\right]\left[\frac{d}{dx}f^*(x)\right] \\
&= \left[g(x)\,\frac{d}{dx}f^*(x)\right]_{t_0}^{t_0+T} \\
&\quad - \int_{t_0}^{t_0+T} dx\, \left\{\frac{d}{dx}\left[f^*(x)\,\frac{d}{dx}g(x)\right] - f^*(x)\left[\frac{d^2}{dx^2}g(x)\right]\right\}
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \int_{t_0}^{t_0+T} dx\, f^*(x)\left[\frac{d^2}{dx^2}g(x)\right] \\
&\quad -\left[f^*(x)\frac{d}{dx}g(x)\right]_{t_0}^{t_0+T} + \left[g(x)\frac{d}{dx}f^*(x)\right]_{t_0}^{t_0+T} \\
&= \int_{t_0}^{t_0+T} dx\, f^*(x)\left[\mathcal{L}g(x)\right] - F(b,a),
\end{aligned}
$$

onde

$$
F(b,a) \equiv \left[f^*(x)\frac{d}{dx}g(x)\right]_{t_0}^{t_0+T} - \left[g(x)\frac{d}{dx}f^*(x)\right]_{t_0}^{t_0+T}.
$$

Logo, vemos que d^2/dt^2 é auto-adjunto e, para termos $F(b,a) = F(t_0+T, t_0) = 0$, a condição é que seja satisfeita a seguinte igualdade:

$$
\left[g(x)\frac{d}{dx}f^*(x)\right]_{t_0}^{t_0+T} = \left[f^*(x)\frac{d}{dx}g(x)\right]_{t_0}^{t_0+T}.
$$

Neste caso, quando $F(b,a) = 0$, também dizemos que o operador $\mathcal{L} = d^2/dt^2$ é hermitiano.

Propriedades de operadores hermitianos

Autovalores reais

Suponhamos que temos um operador hermitiano, $\mathcal{L}$, que, para uma função específica, ψ, aconteça o seguinte:

$$
\mathcal{L}\psi(x) = \lambda_\psi r(x)\psi(x).
$$

Dizemos então que a função ψ é autofunção de $\mathcal{L}$ e que λ_ψ é seu respectivo autovalor. Agora vamos demonstrar que este autovalor é real. Desta equação segue que

$$
\int_a^b dx\, \psi^*(x)\,\mathcal{L}\psi(x) = \lambda_\psi \int_a^b dx\, r(x)\,\psi^*(x)\,\psi(x),
$$

Podemos agora tomar a equação conjugada complexa desta e obter:

$$
\int_a^b dx\, \psi(x)\,\mathcal{L}\psi^*(x) = \lambda_\psi^* \int_a^b dx\, r(x)\,\psi(x)\,\psi^*(x),
$$

Agora consideremos o que segue:

$$
\left[\int_a^b dx\, \psi^*(x)\,\mathcal{L}\psi(x)\right]^* = \int_a^b dx\, \psi(x)\left[\mathcal{L}\psi(x)\right]^*.
$$

Mas $\mathcal{L}$ é hermitiano e, portanto, $\forall f, g$ no intervaldo $[a,b]$,

$$
\int_a^b dx\, f^*(x)\left[\mathcal{L}g(x)\right] = \int_a^b dx\, \left[\mathcal{L}f(x)\right]^* g(x).
$$

Então,

$$\int_a^b dx\, \psi(x) [\mathcal{L}\psi(x)]^* = \int_a^b dx\, \psi^*(x) [\mathcal{L}\psi(x)]$$
$$= \int_a^b dx\, \psi^*(x) \mathcal{L}\psi(x).$$

Usando este resultado obtemos estas duas equações:

$$\int_a^b dx\, \psi^*(x) \mathcal{L}\psi(x) = \lambda_\psi \int_a^b dx\, r(x) \psi^*(x) \psi(x),$$

e

$$\int_a^b dx\, \psi(x) \mathcal{L}\psi^*(x) = \int_a^b dx\, \psi^*(x) \mathcal{L}\psi(x)$$
$$= \lambda_\psi^* \int_a^b dx\, r(x) \psi^*(x) \psi(x),$$

que, quando subtraídas uma da outra, resultam em

$$\left(\lambda_\psi^* - \lambda_\psi\right) \int_a^b dx\, \psi^*(x) [\mathcal{L}\psi(x)] = 0.$$

Não é definida como autofunção a função nula e, portanto, $\psi \neq 0$. Então, segue que

$$\lambda_\psi^* = \lambda_\psi,$$

ou seja, $\lambda_\psi \in \mathbb{R}$, *quod erat demonstrandum.*

Duas autofunções linearmente independentes são ortogonais para autovalores distintos

Suponhamos que temos um operador hermitiano, $\mathcal{L}$, que, para duas funções linearmente independentes específicas, ψ e φ, aconteça o seguinte:

$$\mathcal{L}\psi(x) = \lambda_\psi r(x) \psi(x) \tag{1}$$

e

$$\mathcal{L}\varphi(x) = \lambda_\varphi r(x) \varphi(x), \tag{2}$$

com

$$\lambda_\varphi \neq \lambda_\psi.$$

Dizemos então, como já mencionamos acima, que as funções ψ e φ são autofunções de $\mathcal{L}$ e que λ_ψ e λ_φ são seus respectivos autovalores. Note que nem toda função do intervalo em questão é autofunção de $\mathcal{L}$. Por exemplo, a função $\psi + \varphi$ não é uma autofunção de $\mathcal{L}$, uma vez que $\lambda_\varphi \neq \lambda_\psi$.

Agora vamos demonstrar que essas duas autofunções com autovalores distintos são ortogonais. Das Eqs. (1) e (2), obtemos:

$$\int_a^b dx\, \varphi^*(x)\, \mathcal{L}\psi(x) \;=\; \lambda_\psi \int_a^b dx\, r(x)\, \varphi^*(x)\, \psi(x) \tag{3}$$

e

$$\int_a^b dx\, \psi^*(x)\, \mathcal{L}\varphi(x) \;=\; \lambda_\varphi \int_a^b dx\, r(x)\, \psi^*(x)\, \varphi(x)\,,$$

Já sabemos que os autovalores são reais e, portanto,

$$\int_a^b dx\, \psi(x)\, [\mathcal{L}\varphi(x)]^* \;=\; \lambda_\varphi \int_a^b dx\, r(x)\, \psi(x)\, \varphi^*(x)\,,$$

e, das propriedades que já demonstramos, vem:

$$\int_a^b dx\, \varphi^*(x)\, [\mathcal{L}\psi(x)] \;=\; \lambda_\varphi \int_a^b dx\, r(x)\, \psi(x)\, \varphi^*(x)\,,$$

Substituindo esta equação na Eq. (3), dá:

$$\lambda_\varphi \int_a^b dx\, r(x)\, \psi(x)\, \varphi^*(x) \;=\; \lambda_\psi \int_a^b dx\, r(x)\, \varphi^*(x)\, \psi(x)\,,$$

isto é,

$$(\lambda_\varphi - \lambda_\psi) \int_a^b dx\, r(x)\, \psi(x)\, \varphi^*(x) \;=\; 0. \tag{4}$$

Como, por hipótese,

$$\lambda_\varphi \;\neq\; \lambda_\psi,$$

segue, assim, que

$$\int_a^b dx\, r(x)\, \varphi^*(x)\, \psi(x) \;=\; 0$$

e as funções ψ e φ são ortogonais, *quod erat demonstrandum.* A integral acima, $\int_a^b dx\, r(x)\, \varphi^*(x)\, \psi(x)$, é o produto interno ou produto escalar entre $\varphi(x)$ e $\psi(x)$, também denotado por

$$\langle \varphi | \psi \rangle \;\equiv\; \int_a^b dx\, r(x)\, \varphi^*(x)\, \psi(x)\,.$$

(A notação acima é a dos "bras" e "kets" que o Dirac inventou. Um "ket", denotado $|\psi\rangle$, representa o estado quântico cuja função de onda é dada por $\psi(x)$. O "bra" $\langle\psi|$ é o funcional linear dual ao estado representado pelo "ket" $|\psi\rangle$. O produto escalar entre dois estados quânticos cujos "kets" são $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ é dado pelo "bracket" ("bra+ket" $\langle\varphi|\psi\rangle$).

Completeza do conjunto de autofunções de um operador hermitiano

O conjunto de todas autofunções de um operador hermitiano é completo quando considerarmos o conjunto de autofunções de $\mathcal{L}^{\dagger} = \mathcal{L}$ no intervalo $[a, b]$, isto é, $\{\psi_0, \psi_1, \psi_2, \ldots\}$, e qualquer função do intervalo puder ser expandida como uma combinação linear dessas autofunções:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x).$$

Nem sempre isto é verdade. Para uma discussão profunda sobre a completeza de autofunções de operadores hermitianos especiais, veja o link https://people.math.osu.edu/gerlach.1/math/BVtypset, na página 54. Aqui, no entanto, vamos supor que seja possível e trabalhar com esta hipótese.

Vamos supor que o conjunto de autofunções que encontramos, $\{\psi_0, \psi_1, \psi_2, \ldots\}$, já esteja ortonormalizado e, assim, podemos escrever:

$$\begin{aligned}
\int_a^b dx\, r(x)\, \psi_m(x)\, f(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \int_a^b dx\, r(x)\, \psi_m(x)\, \psi_n(x) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \delta_{m,n} \\
&= c_m.
\end{aligned}$$

Então, temos:

$$c_n = \int_a^b dx'\, r(x')\, \psi_n^*(x')\, f(x').$$

"Função" delta de Dirac e a relação de completeza

Suponhamos que temos um operador hermitiano $\mathcal{L}$ e que $\psi_n(x)$ seja um um conjunto completo de auto-funções ortonormais de $\mathcal{L}$. Então, para qualquer função $f(x)$ definida no intervalo $[a, b]$, podemos escrever

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x)$$

onde $c_n \in \mathbb{C}$ e, como vimos,

$$c_n = \int_a^b dx'\, r(x')\, \psi_n^*(x')\, f(x').$$

Assim, podemos escrever

$$\begin{aligned}
f(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \int_a^b dx'\, r(x')\, \psi_n^*(x')\, f(x')\, \psi_n(x) \\
&= \int_a^b dx' \left[\sum_{n=0}^{\infty} r(x')\, \psi_n^*(x')\, \psi_n(x) \right] f(x').
\end{aligned}$$

Definimos a chamada “função” delta de Dirac como sendo a “função” $\delta(x - x')$ tal que, para qualquer função $f(x)$, temos

$$f(x) = \int_a^b dx' \, \delta(x' - x) f(x'),$$

para todo $x \in [a, b]$. Então, como vimos acima, concluímos que, quando o conjunto de funções ortonormais é completo, segue que

$$\sum_{n=0}^{\infty} r(x') \psi_n^*(x') \psi_n(x) = \delta(x' - x).$$

Esta é a chamada condição de completeza.

Podemos sempre escolher uma base ortonormal real

Agora veja que quando temos uma base completa do tipo $\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \varphi_2(x), \ldots\}$, segue que $\{\varphi_0^*(x), \varphi_1^*(x), \varphi_2^*(x), \ldots\}$ também é uma base completa. Podemos sempre, para cada par de funções complexas, $\varphi_n(x)$ e $\varphi_n^*(x)$, formar duas novas funções reais:

$$\begin{aligned} \zeta_n(x) &\equiv \varphi_n(x) + \varphi_n^*(x) \\ &= 2\mathrm{Re}[\varphi_n(x)] \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \eta_n(x) &\equiv i[\varphi_n^*(x) - \varphi_n(x)] \\ &= 2\mathrm{Im}[\varphi_n(x)]. \end{aligned}$$

Se o par de funções original já fosse linearmente dependente, isto é, se ou $\varphi_n(x)$ era ou real ou imaginária, então só uma dessas duas funções é diferente de zero. Caso o par já fosse linearmente independente, isto é, com uma parte real e outra imaginária linearmente independentes, então as duas funções que acabamos de definir também são diferentes e linearmente indepedentes. Com isso, vemos que escolher um conjunto de autofunções reais é sempre possível e aí basta usarmos o método de Gram & Schmidt para tornar o conjunto ortonormal.