

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"
CAMPUS DE GUARATINGUETÁ

MARCELA DE ALBUQUERQUE RODRIGUES

Uma Introdução à Pseudo-Hermiticidade

Guaratinguetá

2024

Marcela de Albuquerque Rodrigues

Uma Introdução à Pseudo-Hermiticidade

Trabalho de Graduação apresentado ao Conselho de Curso de Graduação em Física - Bacharelado da Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, como parte dos requisitos para obtenção do diploma de Graduação em Física - Bacharelado .

Orientador: Prof^o Dr. Júlio Marny Hoff da Silva

Guaratinguetá

2024

R696i	Rodrigues, Marcela de Albuquerque Uma Introdução à Pseudo-Hermiticidade / Marcela de Albuquerque Rodrigues - Guaratinguetá, 2024. 51 f : il. Bibliografia: f. 51 Trabalho de Graduação em Física – Universidade Estadual Paulista, Faculdade de Engenharia e Ciências de Guaratinguetá, 2024. Orientador: Prof. Dr. Julio Marny Hoff da Silva 1. Teoria quântica. 2. Hilbert - Espaço de. 3. Teoria dos grupos. I. Título. CDU 530.145
-------	--

Luciana Máximo
Bibliotecária/CRB-8 3595

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"
CAMPUS DE GUARATINGUETÁ

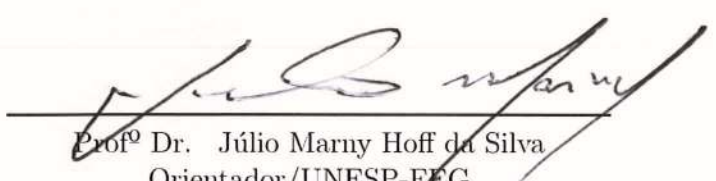
MARCELA DE ALBUQUERQUE RODRIGUES

ESTE TRABALHO DE GRADUAÇÃO FOI JULGADO ADEQUADO COMO PARTE DO
REQUISITO PARA A OBTENÇÃO DO DIPLOMA DE "GRADUANDO EM FÍSICA -
BACHARELADO "

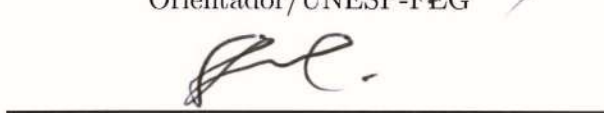
APROVADO EM SUA FORMA FINAL PELO CONSELHO DE CURSO DE
GRADUAÇÃO EM FÍSICA - BACHARELADO

Profº Dr. ELIAS LEITE MENDONÇA
Coordenador

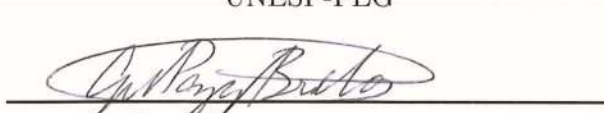
BANCA EXAMINADORA:



Profº Dr. Júlio Marny Hoff da Silva
Orientador/UNESP-FEG



Profº Dr. Saulo Henrique Pereira
UNESP-FEG



Profº Dr. Gustavo Pazzini de Brito
UNESP-FEG

Novembro , 2024

DADOS CURRICULARES

MARCELA DE ALBUQUERQUE RODRIGUES

NASCIMENTO 06/05/1998 - Lorena / SP

FILIAÇÃO Marcelo Antônio Rodrigues
Rosane de Albuquerque Custódio Rodrigues

2016 / 2024 Curso de Graduação em Física - Bacharelado
Faculdade de Engenharia e Ciências de
Guaratinguetá - UNESP

Dedico este trabalho a todos aqueles que me motivaram, e à minha sobrinha Maysa.

AGRADECIMENTOS

Agradeço em primeiro lugar à minha família, que sempre estiveram e estarão ao meu lado, me apoiando desde que escolhi esta carreira há (bons) anos atrás; agradeço à minha mãe Rosane por me ensinar paciência, ao meu pai Marcelo por me ensinar persistência, à minha irmã Thaís por me ensinar parceria, e também aos meus avós, tios e primos que sempre acreditaram em mim. Sem todos vocês, eu não teria conseguido chegar até aqui e espero sempre continuar contando com seu amor.

Aos amigos, tanto aqueles que vieram e foram quanto os que vieram e ficaram. Agradeço a todos com quem tive ótimas conversas ao longo dos anos sobre a graduação, a carreira, a vida, o universo e tudo mais. Estas foram insubstituíveis para mim e sempre terão um imenso valor. Saibam que sempre podem contar comigo também, assim como contei com todos vocês ao longo da jornada.

Ao meu parceiro Patrick, com quem eu escolhi partilhar meus dias e noites - apesar do fuso horário - pelo apoio e pela motivação constante. Você me ajudou a deixar de lado minhas inseguranças e focar no que realmente importa; essa reta final da minha formação ficou muito mais fácil do seu lado, e sei que ainda teremos muitos inícios, meios e finais (felizes) juntos. Jeg elsker dig!

Ao meu orientador, Júlio Marny Hoff, agradeço pelos ensinamentos e pelas conversas. Muitas das suas aulas foram responsáveis por reacender a paixão que eu sempre tive pela Física e a sua confiança na minha trajetória desde que começamos nosso projeto, ainda que ele tenha mudado de forma e objetivo, foi fundamental para que eu acreditasse em mim mesma e na minha capacidade de chegar ao final deste curso.

E finalmente, agradeço à todos os professores com quem tive aulas, trabalhei ou colaborei ao longo da minha graduação, e em especial, aos professores Gustavo e Saulo, por aceitaram compor a banca para a apresentação deste trabalho e fazerem parte desse momento tão especial para mim.

O caminho foi longo e difícil, mas cada um de vocês tiveram um papel em momentos diferentes na minha carreira e sempre serei grata por todas as experiências positivas que me foram proporcionadas nos últimos anos.

“Tudo o que temos de decidir é o que fazer com o tempo que nos é dado.”
(J.R.R. Tolkien)

RESUMO

Este trabalho aborda inicialmente o conceito de raios vetoriais e representação de raios operatoriais de acordo com estudos de E. Wigner e V. Bargmann. Amplia-se a discussão em torno de representações ao investigarmos, baseado nos trabalhos de A. Mostafazadeh, operadores pseudo-Hermiteanos - uma generalização da Hermiticidade que pode incluir outros tipos de simetria do sistema e que permite a existência de espectros complexos. O presente trabalho tem como objetivo uma abordagem inicial dos conceitos citados, de modo a introduzir o estudante às ideias apresentadas.

PALAVRAS-CHAVE: Mecânica Quântica; Raios Operatoriais; Pseudo-Hermiticidade.

ABSTRACT

This work initially addresses the concept of vector rays and operator ray representations according to studies by E. Wigner and V. Bargmann. The discussion on representations is further developed by investigating, based on the works of A. Mostafazadeh, pseudo-Hermitian operators — a generalization of Hermiticity that can encompass other types of system symmetries and allows for the existence of complex spectra. The objective of this work is to provide an introductory approach to these concepts, introducing students to the presented ideas.

KEYWORDS: Quantum Mechanics; Operator Rays; Pseudo-Hermiticity.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
2	FUNDAMENTOS	12
2.1	Noções introdutórias	12
2.2	Raios vetoriais e a função distância	13
2.3	Raios operatoriais e continuidade	15
2.4	O Teorema de Wigner	22
3	HERMITICIDADE E PSEUDO-HERMITICIDADE	31
3.1	Noções introdutórias	31
3.2	Hermiticidade e o produto interno	32
3.3	Pseudo-hermiticidade e conjugação pseudo-hermiteana	34
3.4	Novo produto interno	38
3.5	Sistemas biortonormais e autovalores complexos	43
4	CONSIDERAÇÕES FINAIS	50
	REFERÊNCIAS	51

1 INTRODUÇÃO

A representação de sistemas quântico, de raios a vetores de estado, será o tópico de discussão neste trabalho. Então começamos por definições preliminares de como tais representações são usualmente feitas: um certo sistema quântico pode ser representado por um vetor $|\psi\rangle$ em um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ dotado de um produto interno $\langle \cdot | \cdot \rangle$. O vetor, como exemplificado em (SAKURAI, 1985) ao citar o experimento de Stern-Gerlach (1922), assim como todo o espaço de Hilbert a que este pertence, deve ser construído sobre o corpo dos complexos $\mathbb{C}$. Também é construído um funcional linear $\phi(|\psi\rangle)$, elemento do espaço dual $\mathcal{H}^*$, de modo que sua associação junto a um elemento de $\mathcal{H}$ leve a um número complexo:

$$\phi : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C} \quad (1.1)$$

$$|\psi\rangle \mapsto \phi(|\psi\rangle) = \langle \phi | \psi \rangle. \quad (1.2)$$

Tal associação dá a definição do produto interno usual dentro do espaço de Hilbert, que pela notação de Dirac criada em 1939, é chamado braket; os vetores de $\mathcal{H}$ são usualmente chamados de “kets” e seus correspondentes duais em $\mathcal{H}^*$ são chamados “bras”. Uma definição mais precisa que será explorada ao longo do Capítulo 1 expande o conceito dos vetores do espaço de Hilbert para *raios vetoriais*.

Quanto às transformações de sistemas quânticos, estas são representadas algebricamente por operadores que atuam sobre vetores em $\mathcal{H}$ e os modificam, segundo (COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOE, 1977) de uma forma genérica:

$$A |\psi\rangle = |\psi'\rangle. \quad (1.3)$$

Ainda, atuações especiais podem levar a uma equação de autovalor para o operador A , com autovetor (ou autoestado) $|\psi\rangle$ e certo autovalor a . Para operadores que definem observáveis, é comumente exigido que seus autovalores sejam reais, para que seja mantida uma coerência entre possíveis medidas experimentais e suas representações algébricas. O conceito dos operadores também será refinado pelo de *raios operatoriais*.

A exigência da realidade do espectro dos operadores geralmente leva a teorias quânticas que exigem que estes observáveis tenham representações Hermiteanas, conceito este intimamente ligado à definição do produto interno do espaço de Hilbert, e que garante não apenas a realidade do espectro como um todo, mas a possibilidade de definir os autovetores de tal operador como base do espaço.

Um importante operador na Mecânica Quântica é o operador Hamiltoniano, conceito proveniente da Mecânica Clássica que pode representar a energia total de um certo sistema. Tal operador é gerador da evolução temporal de um certo estado quântico, regida pela equação de

Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi\rangle, \quad (1.4)$$

onde podemos definir o operador de evolução temporal $U := e^{-iHt/\hbar}$. É exigido que este operador seja unitário, o que levará à exigência da Hermiticidade do Hamiltoniano. O operador Hamiltoniano por si só tem a seguinte relação de autovalor:

$$H |\psi_i\rangle = E_i |\psi_i\rangle, \quad (1.5)$$

em que E_i é o i -ésimo nível de energia do estado quântico $|\psi\rangle$. Como previamente citado, é exigido que estes autovalores sejam reais, o que é mais uma forte motivação para a Hermiticidade deste fundamental operador.

A partir de estudos que se iniciaram na década de 90 por Carl Bender e colaboradores (BENDER; BOETTCHER, 1998), condições mais gerais que a Hermiticidade da Hamiltoniana mas que ainda mantêm as características do espectro como esperadas tem sido investigadas, inicialmente sob a forma de Hamiltonianas com simetria por paridade e inversão temporal, as chamadas Hamiltonianas PT -simétricas. Estudos iniciais da simetria PT em sistemas quânticos usualmente estudados podem ser vistos em (ZNOJIL, 2001), onde trata-se do poço quadrado infinito com simetria PT , e também em (MOSTAFAZADEH, 2005) para uma barreira de potencial com simetria PT .

Neste trabalho, estudamos uma generalização que engloba não apenas os casos investigados por Bender e outros autores como a própria Hermiticidade, a pseudo-Hermiticidade. O estudo da pseudo-Hermiticidade traz consigo a necessidade da definição de um novo produto interno que torna “Hermiteano” um certo operador que pode não ser Hermiteano em relação ao produto usual. Isso nos abre possibilidades de investigação do espectro destes operadores para além de espectros estritamente reais, e sistemas de autovetores mais sofisticados.

No Capítulo 1, estudaremos os conceitos de raios vetoriais e operatoriais de acordo com as definições apresentadas em (BARGMANN, 1954), e também o Teorema de Wigner sobre representação de transformações de simetria, como apresentado em (WIGNER; GRIFFIN, 1959). No Capítulo 2, veremos definições acerca da Hermiticidade e pseudo-Hermiticidade como visto em (MOSTAFAZADEH, 2002a) e (MOSTAFAZADEH, 2010), bem como o produto interno usual do espaço de Hilbert e o produto pseudo-Hermiteano.

2 FUNDAMENTOS

2.1 NOÇÕES INTRODUTÓRIAS

Como é de interesse da Física relacionar sistemas quânticos à observação experimental, comecemos aqui relembrando que se pode modular vetores em $\mathcal{H}$ considerando seu módulo quadrado, ou seja, $|| |\psi\rangle ||^2 = \langle \psi | \psi \rangle$; este módulo é interpretado como a *densidade de probabilidade* correspondente a tal estado. Definamos então que o produto interno neste espaço é linear na segunda entrada, porém antilinear na primeira entrada, ou seja

$$\langle \alpha \psi | \phi \rangle = \alpha^* \langle \psi | \phi \rangle, \quad (2.1)$$

onde $\alpha \in \mathbb{C}$ e α^* é o complexo conjugado de α . Podemos definir também a distância entre dois vetores $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ como $|| |\psi\rangle - |\phi\rangle ||^2$, dada por

$$|| |\psi\rangle - |\phi\rangle ||^2 = (\langle \psi | - \langle \phi |)(|\psi\rangle - |\phi\rangle) = \langle \psi | \psi \rangle - \langle \psi | \phi \rangle - \langle \phi | \psi \rangle + \langle \phi | \phi \rangle. \quad (2.2)$$

O produto $\langle \psi | \psi \rangle$ é a norma ao quadrado do vetor $|\psi\rangle$, e aqui consideraremos ambos os vetores de norma unitária $|| |\psi\rangle || = || |\phi\rangle || = 1$, então

$$|| |\psi\rangle - |\phi\rangle ||^2 = || |\psi\rangle ||^2 - \langle \psi | \phi \rangle - \langle \phi | \psi \rangle + || |\phi\rangle ||^2 = 2 - (\langle \psi | \phi \rangle + \langle \phi | \psi \rangle). \quad (2.3)$$

Analisemos brevemente o produto $\langle \psi | \phi \rangle$, sabendo que os vetores no espaço de Hilbert são complexos, logo podem ser escritos como $|\psi\rangle = \text{Re } |\psi\rangle + i \text{Im } |\psi\rangle$, com $\text{Re } |\psi\rangle \in \mathbb{R}$ e $\text{Im } |\psi\rangle \in \mathbb{R}$:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \text{Re } |\psi\rangle \text{Re } |\phi\rangle + \text{Im } |\psi\rangle \text{Im } |\phi\rangle + i(\text{Re } |\psi\rangle \text{Im } |\phi\rangle - \text{Re } |\phi\rangle \text{Im } |\psi\rangle) \quad (2.4)$$

e o conjugado deste produto, $\langle \phi | \psi \rangle$, é

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^* = \text{Re } |\psi\rangle \text{Re } |\phi\rangle + \text{Im } |\psi\rangle \text{Im } |\phi\rangle - i(\text{Re } |\psi\rangle \text{Im } |\phi\rangle - \text{Re } |\phi\rangle \text{Im } |\psi\rangle). \quad (2.5)$$

Note que, sendo o produto interno também um número complexo, podemos reconhecer uma parte real $\text{Re } \langle \psi | \phi \rangle = \text{Re } |\psi\rangle \text{Re } |\phi\rangle + \text{Im } |\psi\rangle \text{Im } |\phi\rangle$ e uma parte imaginária $\text{Im } \langle \psi | \phi \rangle = \text{Re } |\psi\rangle \text{Im } |\phi\rangle - \text{Re } |\phi\rangle \text{Im } |\psi\rangle$. Com estas considerações, temos a distância

$$|| |\psi\rangle - |\phi\rangle ||^2 = 2 \{1 - \text{Re}(\langle \psi | \phi \rangle)\}, \quad (2.6)$$

e considerando que para todo número complexo τ , temos que $\text{Re}(\tau) \leq |\tau|$, o mesmo será válido aqui. Assim

$$|| |\psi\rangle - |\phi\rangle ||^2 \leq 2 |1 - \langle \psi | \phi \rangle|. \quad (2.7)$$

2.2 RAIOS VETORIAIS E A FUNÇÃO DISTÂNCIA

Pode ser observado que um sistema representado por um vetor arbitrário $|\psi\rangle$ pode também ser representado por múltiplos deste vetor $\tau|\psi\rangle$, onde τ é um número complexo de módulo unitário, sem alteração de sua densidade de probabilidade. Utilizemos então definições apresentadas em (BARGMANN, 1954): considere um *raio vetorial* Ψ no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ composto pelo conjunto de vetores da forma $\tau|\psi_0\rangle$, onde $|\psi_0\rangle$ é um vetor fixo de norma unitária e τ um número complexo de módulo unitário. Qualquer vetor $|\psi\rangle$ contido em Ψ será chamado um *representativo do raio* Ψ .

O produto interno de dois raios $\Psi \cdot \Phi$ é definido como o módulo do produto interno de dois representativos $|\psi\rangle = \tau|\psi_0\rangle \in \Psi$ e $|\phi\rangle = \sigma|\phi_0\rangle \in \Phi$ destes raios:

$$\Psi \cdot \Phi = |\langle\psi|\phi\rangle|. \quad (2.8)$$

Pela desigualdade de Schwarz, temos:

$$\langle\psi|\phi\rangle^2 \leq \langle\psi|\psi\rangle \cdot \langle\phi|\phi\rangle, \quad (2.9)$$

onde podemos utilizar da definição do representativo, escrevendo

$$\langle\psi|\phi\rangle^2 \leq \langle\tau\psi_0|\tau\psi_0\rangle \cdot \langle\sigma\phi_0|\sigma\phi_0\rangle. \quad (2.10)$$

Pela sesquilinearidade do produto, ficamos com

$$\langle\psi|\phi\rangle^2 \leq |\tau|^2 \langle\psi_0|\psi_0\rangle \cdot |\sigma|^2 \langle\phi_0|\phi_0\rangle. \quad (2.11)$$

Como estabelecido anteriormente, $|\psi_0\rangle$ e $|\phi_0\rangle$ têm norma unitária e τ e σ , módulo unitário. Logo

$$\Psi \cdot \Phi = |\langle\psi|\phi\rangle| \leq 1. \quad (2.12)$$

Podemos ver que $\Psi \cdot \Phi = 1$ se, e somente se, $\Psi = \Phi$.

Definimos agora a função distância $d(\Psi, \Phi) = |||\psi\rangle - |\phi\rangle||$ entre dois raios como a distância mínima entre dois representativos. De (2.6), temos que

$$|||\psi\rangle - |\phi\rangle||^2 = 2\{1 - \text{Re}(\tau^*\sigma\langle\psi_0|\phi_0\rangle)\}. \quad (2.13)$$

Note que podemos escrever $\langle\psi_0|\phi_0\rangle = |\lambda||\langle\psi_0|\phi_0\rangle|$, onde $\lambda \in \mathbb{C}$ e $|\lambda| = 1$. Assim

$$|\langle\psi_0|\phi_0\rangle| = |\tau||\sigma||\langle\psi_0|\phi_0\rangle|. \quad (2.14)$$

Logo, podemos mais uma vez valermos-nos das propriedades do produto interno e escrever

$$|\langle\psi_0|\phi_0\rangle| = |\tau^*\sigma\langle\psi_0|\phi_0\rangle| = |\langle\tau\psi_0|\sigma\phi_0\rangle| = |\langle\psi|\phi\rangle| = \Psi \cdot \Phi. \quad (2.15)$$

Então

$$|| |\psi\rangle - |\phi\rangle ||^2 = 2 \{1 - \text{Re}(\tau^* \sigma \lambda) \Psi \cdot \Phi\}. \quad (2.16)$$

A norma atingirá seu valor mínimo quando $\text{Re}(\tau^* \sigma \lambda) = 1$, e então temos a definição da distância $d(\Psi, \Phi)$

$$d(\Psi, \Phi) = [2(1 - \Psi \cdot \Phi)]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.17)$$

Note que a função distância será mínima para raios paralelos, e máxima para raios ortogonais, ou seja, a função é limitada. Assim, podemos utilizar do fato que, em um espaço métrico completo, A é dito contínuo em relação a B se o conjunto de valores não-nulos de A é limitado por B . Neste sentido, analisemos o seguinte lema:

Lema 1. *O produto escalar $\Psi \cdot \Phi$ é contínuo em ambos os fatores com respeito à métrica $d(\Psi, \Phi)$.*

Prova: Com a observação anterior em mente, provaremos a continuidade do produto interno em cada fator demonstrando que $|f(\Psi_1) - f(\Psi_2)|$ é limitado pela função distância. Considere três raios Ψ_1 , Ψ_2 e Φ , com seus respectivos representativos $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ e $|\phi\rangle$, todos de norma unitária. Considere também a seguinte distância, utilizando da desigualdade triangular:

$$|\Psi_1 \cdot \Phi - \Psi_2 \cdot \Phi| = || \langle \psi_1 | \phi \rangle | - | \langle \psi_2 | \phi \rangle || \leq | \langle \psi_1 | \phi \rangle - \langle \psi_2 | \phi \rangle |. \quad (2.18)$$

Por propriedade do produto interno, teremos

$$|\Psi_1 \cdot \Phi - \Psi_2 \cdot \Phi| \leq | \langle \psi_1 - \psi_2 | \phi \rangle |. \quad (2.19)$$

Note então que

$$| \langle \psi_1 - \psi_2 | \phi \rangle |^2 = \langle \psi_1 - \psi_2 | \phi \rangle^* \langle \psi_1 - \psi_2 | \phi \rangle = \langle \phi | \psi_1 - \psi_2 \rangle \langle \psi_1 - \psi_2 | \phi \rangle. \quad (2.20)$$

Abrindo o produto, temos

$$| \langle \psi_1 - \psi_2 | \phi \rangle |^2 = || |\phi\rangle ||^2 || |\psi_1\rangle ||^2 - || |\phi\rangle ||^2 \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle - || |\phi\rangle ||^2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + || |\phi\rangle ||^2 || |\psi_2\rangle ||^2. \quad (2.21)$$

Lembremos que lidamos com vetores de norma unitária, e também nos valeremos da soma de um produto com seu conjugado, analisada na seção anterior

$$| \langle \psi_1 - \psi_2 | \phi \rangle |^2 = 2 - (\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle + \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle) = 2 \{1 - \text{Re}(\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle)\} \quad (2.22)$$

e então, de (2.6), ficamos com

$$| \langle \psi_1 - \psi_2 | \phi \rangle |^2 = || |\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle ||^2 \implies | \langle \psi_1 - \psi_2 | \phi \rangle | = d(\Psi_1, \Psi_2). \quad (2.23)$$

Assim, podemos chegar no limitante:

$$|\Psi_1 \cdot \Phi - \Psi_2 \cdot \Phi| \leq d(\Psi_1, \Psi_2). \quad (2.24)$$

Agora, considere os seguintes raios Ψ , Φ_1 e Φ_2 com seus respectivos representativos ψ , ϕ_1 e ϕ_2 . Similarmente, utilizando novamente da desigualdade triangular e propriedades do produto interno:

$$|\Psi \cdot \Phi_1 - \Psi \cdot \Phi_2| = ||\langle \psi | \phi_1 \rangle| - |\langle \psi | \phi_2 \rangle|| \leq |\langle \psi | \phi_1 - \phi_2 \rangle|. \quad (2.25)$$

Seguindo os mesmos passos da primeira parte da prova, temos

$$|\langle \psi | \phi_1 - \phi_2 \rangle|^2 = \langle \psi | \phi_1 - \phi_2 \rangle^* \langle \psi | \phi_1 - \phi_2 \rangle = \langle \phi_1 - \phi_2 | \psi \rangle \langle \psi | \phi_1 - \phi_2 \rangle, \quad (2.26)$$

de modo que

$$|\langle \psi | \phi_1 - \phi_2 \rangle|^2 = ||\phi_1\rangle - |\phi_2\rangle||^2 \implies |\langle \psi | \phi_1 - \phi_2 \rangle| = ||\phi_1\rangle - |\phi_2\rangle|| = d(\Phi_1, \Phi_2). \quad (2.27)$$

Logo

$$|\Psi \cdot \Phi_1 - \Psi \cdot \Phi_2| \leq d(\Phi_1, \Phi_2). \quad \square \quad (2.28)$$

Tratamos da representação de estados nesta seção e da continuidade da operação que os relaciona, o produto interno. O próximo passo para representar um sistema quântico é relacionar os fenômenos que nele ocorrem ao formalismo de operadores.

2.3 RAIOS OPERATORIAIS E CONTINUIDADE

Levando em consideração a observação final da seção anterior, é natural que o formalismo operatorial seja amplamente utilizado para representar fenômenos físicos dentro da Mecânica Quântica. Tal qual observamos para vetores $|\psi\rangle$, os operadores também podem ser agrupados em raios. Novamente seguindo as definições em (BARGMANN, 1954): um *raio operatorial unitário* $\mathbf{U}$ será definido como o conjunto de todos os operadores no espaço de Hilbert da forma τU_0 , onde U_0 é um operador unitário e τ , um número complexo de módulo unitário. Qualquer operador U contido em $\mathbf{U}$ será chamado de representativo do raio $\mathbf{U}$. Note que similarmente à propriedade dos representativos do raio Ψ , a atuação de um representativo de um raio operatorial mantém o produto interno inalterado:

$$\langle U\psi | U\phi \rangle = \langle \tau U_0\psi | \tau U_0\phi \rangle. \quad (2.29)$$

Utilizando propriedades do produto, bem como a unitariedade de U_0 e definição de τ :

$$\langle U\psi | U\phi \rangle = ||\tau||^2 \langle U_0^{-1} U_0\psi | \phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle. \quad (2.30)$$

Para organizar o espaço dos operadores, considere a seguinte definição de grupo (BARATA, 2024):

Um grupo é um conjunto não vazio G dotado de uma operação binária $G \times G \rightarrow G$, denotada por “ $\cdot$ ” e denominada *produto*, e de uma operação unária $G \rightarrow G$ (bijetora) denominada *inversa*, denotada por “ -1 ” sobrescrito ao elemento do conjunto, tais que as seguintes propriedades são satisfeitas:

1. *Associatividade*: Para todo $r, s, u \in G$, vale $(r \cdot s) \cdot t = r \cdot (s \cdot t)$;
2. *Elemento neutro*: Existe um único elemento $e \in G$, denominado elemento neutro, tal que $r \cdot e = e \cdot r = r$ para todo $r \in G$;
3. *Inversa*: Para cada $r \in G$, existe um único elemento $v \in G$ tal que $r \cdot v = v \cdot r = e$. Esse elemento é denominado a inversa de r , denotado por r^{-1} .

Podemos então dizer que diferentes operadores formam um grupo quando satisfazem as propriedades acima. Assim, observemos as seguintes definições:

- O produto $\mathbf{UV}$ de dois raios é o raio operatorial que contém todos os produtos UV , com $U \in \mathbf{U}$ e $V \in \mathbf{V}$;
- O raio $\mathbf{1}$ é aquele que contém o operador unidade;
- A inversa $\mathbf{U}^{-1}$ de um raio $\mathbf{U}$ consiste de todos os operadores U^{-1} , com $U \in \mathbf{U}$. Claramente, $\mathbf{UU}^{-1} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{U} = \mathbf{1}$.

O raio vetorial $\mathbf{U\Psi}$ consiste de todos os vetores $|U\psi\rangle$, com $U \in \mathbf{U}$ e $|\psi\rangle \in \mathbf{\Psi}$. Dada a unitariedade do raio operatorial, temos que:

$$\mathbf{U\Psi} \cdot \mathbf{U\Phi} = |\langle U\psi|U\phi\rangle| = |\langle \psi|\phi\rangle| = \mathbf{\Psi} \cdot \mathbf{\Phi} \quad (2.31)$$

e, como consequência, lembrando da definição de distância em (2.17), $d(\mathbf{U\Psi}, \mathbf{U\Phi}) = d(\mathbf{\Psi}, \mathbf{\Phi})$, a ação de um mesmo operador unitário em dois raios vetoriais distintos não altera a distância entre estes raios.

Com as definições dadas até agora, podemos então falar sobre as representações de raio. Uma representação de raio de um grupo G , com elementos $r, s, \dots$ ¹ e o elemento neutro e , é um mapeamento $r \rightarrow \mathbf{U}_r$ dos elementos do grupo em raios operatoriais unitários, tal que as propriedades de uma representação de grupo (BARATA, 2024) são respeitadas:

- i. $\mathbf{U}_r\mathbf{U}_s = \mathbf{U}_{rs}$;
- ii. $\mathbf{U}_e = \mathbf{1}$;
- iii. $\mathbf{U}_{r^{-1}} = \mathbf{U}_r^{-1}$, para quaisquer $r, s \in G$.

¹ Como são elementos de um grupo, denotaremos cada elemento que é parte de um dado grupo G por letras minúsculas, $r, s, \dots \in G$, para evitar confusões com a notação para os raios.

Os grupos que buscamos representar são grupos topológicos, ou seja, aqueles em que as operações produto e inversa com elementos do próprio grupo são aplicações contínuas. Logo, o mapeamento $r \rightarrow \mathbf{U}_r$ será também considerado contínuo dada esta propriedade. Agora, observemos a seguinte definição de continuidade para as representações de raio:

Para um elemento qualquer r em G , um raio qualquer Ψ e um $\epsilon > 0$, existe uma vizinhança $\mathfrak{N}$ de r em G tal que $d(\mathbf{U}_s \Psi, \mathbf{U}_r \Psi) < \epsilon$ se $s \in \mathfrak{N}$.

Em outras palavras, a distância entre os raios vetoriais $\mathbf{U}_s \Psi$ e $\mathbf{U}_r \Psi$ será mínima para um mesmo raio operatorial $\mathbf{U}$ se o elemento s do grupo estiver na vizinhança de r . Uma representação de raio que satisfaça tal condição é dita “fortemente contínua”. Dada tal definição, podemos estudar um importante teorema que dita a possibilidade de selecionar conjuntos de operadores fortemente contínuos para um dado grupo G .

Teorema 1. *Seja $\mathbf{U}_r$ uma representação de raio contínua de um grupo G . Para todo elemento r em uma vizinhança $\mathfrak{N}_0$ do elemento neutro e de G , escolhida apropriadamente, pode ser selecionado um conjunto fortemente contínuo de representativos $U_r \in \mathbf{U}_r$ (ou seja, para qualquer vetor $|\psi\rangle$, um qualquer elemento $r \in \mathfrak{N}_0$ e qualquer $\epsilon > 0$ existe uma vizinhança $\mathfrak{N}$ de r tal que $\|U_s |\psi\rangle - U_r |\psi\rangle\| < \epsilon$ se $s \in \mathfrak{N}$)².*

Prova: Seguiremos a prova apresentada em (BARGMANN, 1954) e revisitada em (SILVA; ROCHA, 2021). Seja Ψ um raio fixo em $\mathcal{H}$ e $|\psi\rangle$ um representativo de Ψ . Definimos a função $g_r = \Psi \cdot \mathbf{U}_r \Psi = \langle \psi | U_r \psi \rangle$. Como consequência do Lema 1, g_r é uma função contínua de r visto que o produto interno é contínuo. Podemos então escolher uma vizinhança $\mathfrak{N} \supset r$ do elemento neutro e para um α positivo, $\alpha \in (0, 1)$ tal que $\alpha < g_r \leq 1$ para todo $r \in \mathfrak{N}$.

Para auxiliar o processo da prova, definimos as seguintes quantidades:

- i. $d_{r,s}(\psi) = d(\mathbf{U}_r \Psi, \mathbf{U}_s \Psi)$;
- ii. $\sigma_{r,s}(\psi) = \langle U_r \psi | U_s \psi \rangle$;
- iii. $Z_{r,s}(\psi) = U_s |\psi\rangle - \sigma_{r,s}(\psi) U_r |\psi\rangle$.

Note que as duas primeiras definições acima são feitas para que os cálculos sejam dispostos mais claramente, enquanto $Z_{r,s}(\psi)$ é definido de modo a ser uma quantidade ortogonal à $U_r |\psi\rangle$:

$$\langle U_r \psi | Z_{r,s}(\psi) \rangle = \langle U_r \psi | U_s \psi \rangle - \sigma_{r,s}(\psi) \langle U_r \psi | U_r \psi \rangle \quad (2.32)$$

$$\langle U_r \psi | Z_{r,s}(\psi) \rangle = \sigma_{r,s}(\psi) - \sigma_{r,s}(\psi) \cdot 1 = 0. \quad (2.33)$$

Podemos então verificar, utilizando da definição de $Z_{r,s}(\psi)$, que

$$\|Z_{r,s}(\psi)\|^2 = \langle Z_{r,s}(\psi) | Z_{r,s}(\psi) \rangle = \langle U_s \psi - \sigma_{r,s}(\psi) U_r \psi | U_s \psi - \sigma_{r,s}(\psi) U_r \psi \rangle. \quad (2.34)$$

² Um conjunto de representativos que cumpre este teorema será chamado de *conjunto de representativos admissíveis*.

Abrindo este produto interno, temos

$$||Z_{r,s}(\psi)||^2 = \langle U_s \psi | U_s \psi \rangle - \langle U_s \psi | \sigma_{r,s}(\psi) U_r \psi \rangle - \langle \sigma_{r,s}(\psi) U_r \psi | Z_{r,s}(\psi) \rangle. \quad (2.35)$$

Com atenção à definição de $\sigma_{r,s}(\psi)$, podemos retirá-lo do produto interno acima no segundo e terceiro termo, bem como utilizar $\sigma_{r,s}(\psi)^* = \langle U_s \psi | U_r \psi \rangle$ e $\langle U_r \psi | Z_{r,s}(\psi) \rangle = 0$, demonstrado acima. Também temos $\langle U_s \psi | U_s \psi \rangle = 1$, visto que lidamos com representações de norma unitária. Assim, a relação (2.35) fica

$$||Z_{r,s}(\psi)||^2 = 1 - |\sigma_{r,s}(\psi)|^2 = 1 - (\mathbf{U}_r \Psi \cdot \mathbf{U}_s \Psi)^2. \quad (2.36)$$

Da definição de distância em (2.17), podemos verificar que

$$(d(\Psi, \Phi))^2 = 2(1 - \Psi \cdot \Phi) \rightarrow 1 - \Psi \cdot \Phi = \frac{d^2}{2}. \quad (2.37)$$

Quadrando ambos os lados da equação, temos

$$1 - 2\Psi \cdot \Phi + (\Psi \cdot \Phi)^2 = \frac{d^4}{4} \quad (2.38)$$

e utilizando mais uma vez a definição em (2.17)

$$1 + (d(\Psi, \Phi))^2 - 2 + (\Psi \cdot \Phi)^2 = \frac{d^4}{4}. \quad (2.39)$$

Podemos isolar $d(\Psi, \Phi)$ na expressão acima, de modo que chegamos a

$$1 - (\Psi \cdot \Phi)^2 = d^2 \left(1 - \frac{d^2}{4} \right). \quad (2.40)$$

Visto que $d(\Psi, \Psi) \geq 0$ para todo raio, o termo entre parênteses sempre será menor ou igual a 1. Assim, temos a relação

$$1 - (\Psi \cdot \Phi)^2 \leq (d(\Psi, \Phi))^2, \quad (2.41)$$

o que também será válido para raios vetoriais do tipo $\mathbf{U}\Psi$. Com esta relação, voltamos em (2.36), lembrando que $d_{r,s}(\psi) = d(\mathbf{U}_r \Psi, \mathbf{U}_s \Psi)$:

$$||Z_{r,s}(\psi)||^2 \leq d_{r,s}^2(\psi). \quad (2.42)$$

Considere agora o raio Φ com representativo unitário $|\phi\rangle$. Façamos a mudança $|\psi\rangle \rightarrow |\phi\rangle$ a fim de encontrarmos relações que envolvam U_s e calculemos o produto $\langle \phi | Z_{r,s}(\phi) \rangle$:

$$\langle \phi | Z_{r,s}(\phi) \rangle = \langle \phi | U_s \phi - \sigma_{r,s}(\phi) U_r \phi \rangle. \quad (2.43)$$

Observe que a mudança $|\psi\rangle \rightarrow |\phi\rangle$ é puramente para que possamos manter a coerência com a

notação utilizada no enunciado do Teorema 1.

Abrindo o produto em (2.43), chegamos a

$$\langle \phi | Z_{r,s}(\phi) \rangle = \langle \phi | U_s \phi \rangle - \sigma_{r,s}(\phi) \langle \phi | U_r \phi \rangle. \quad (2.44)$$

Analogamente à $g_r = \langle \psi | U_r \psi \rangle$, temos $g_s = \langle \phi | U_s \phi \rangle$. Então

$$\langle \phi | Z_{r,s}(\phi) \rangle = g_s - \sigma_{r,s}(\phi) g_r, \quad (2.45)$$

onde podemos manipular a expressão, obtendo

$$1 - \sigma_{r,s}(\phi) = \frac{1}{g_r} \{g_r - g_s + \langle \phi | Z_{r,s}(\phi) \rangle\}. \quad (2.46)$$

Como resultado de cálculos anteriores, sabemos que $\| |\psi\rangle - |\psi''\rangle \|^2 \leq 2|1 - \langle \psi | \psi'' \rangle|$. Assim

$$\| U_s |\phi\rangle - U_r |\phi\rangle \|^2 \leq 2|1 - \sigma_{r,s}(\phi)|. \quad (2.47)$$

Desta maneira, podemos encontrar um limitante para a distância entre os raios $\mathbf{U}_r \Phi$ e $\mathbf{U}_s \Phi$, dentro da vizinhança $\mathfrak{N}$, relacionado à quantidade $1 - \sigma_{r,s}(\phi)$, garantindo assim a continuidade do representativo $U_r |\phi\rangle$ nos moldes da continuidade forte definida previamente. Tomando o módulo em (2.46) e aplicando isto em (2.47), teremos

$$\| U_s |\phi\rangle - U_r |\phi\rangle \|^2 \leq 2 \left| \frac{1}{g_r} \{g_r - g_s + \langle \phi | Z_{r,s}(\phi) \rangle\} \right|. \quad (2.48)$$

Das definições requeridas no Teorema 1, $g_r > \alpha$, é lícito reescrevermos a expressão acima (também utilizando propriedades do módulo)

$$\| U_s |\phi\rangle - U_r |\phi\rangle \|^2 \leq \frac{2}{\alpha} \{|g_r - g_s| + |\langle \phi | Z_{r,s}(\phi) \rangle|\}. \quad (2.49)$$

Analisemos cada um dos termos da desigualdade acima; primeiramente, o módulo $|g_r - g_s| = |\langle \phi | U_r \phi \rangle - \langle \phi | U_s \phi \rangle|$. Por propriedade do produto interno, temos que

$$|\langle \phi | U_r \phi \rangle - \langle \phi | U_s \phi \rangle| = |\langle \phi | U_r \phi - U_s \phi \rangle|. \quad (2.50)$$

Da desigualdade de Schwarz, $|\langle a | b \rangle| \leq \|a\| \cdot \|b\|$, ficamos com (aqui o símbolo $\cdot$ se refere ao produto usual)

$$|\langle \phi | U_r \phi - U_s \phi \rangle| \leq \| |\phi\rangle \| \cdot \| U_r |\phi\rangle - U_s |\phi\rangle \|. \quad (2.51)$$

Como $|\phi\rangle$ é unitário, temos

$$|\langle \phi | U_r \phi \rangle - \langle \phi | U_s \phi \rangle| \leq \| U_r |\phi\rangle - U_s |\phi\rangle \| \implies |g_r - g_s| \leq d_{r,s}(\phi). \quad (2.52)$$

Para o segundo termo $|\langle \phi | Z_{r,s}(\phi) \rangle|$ também nos valem da desigualdade de Schwarz e da norma unitária de $|\phi\rangle$, lembrando da relação que chegamos em (2.42):

$$|\langle \phi | Z_{r,s}(\phi) \rangle| \leq \| |\phi\rangle \| \cdot \| Z_{r,s}(\phi) \| \implies |\langle \phi | Z_{r,s}(\phi) \rangle| \leq d_{r,s}(\phi). \quad (2.53)$$

Assim, aplicando (2.52) e (2.53) em (2.49), teremos:

$$\| U_s |\phi\rangle - U_r |\phi\rangle \|^2 \leq \frac{2}{\alpha} \{d_{r,s}(\phi) + d_{r,s}(\phi)\}, \quad (2.54)$$

$$\| U_s |\phi\rangle - U_r |\phi\rangle \|^2 \leq \frac{4}{\alpha} d_{r,s}(\phi), \quad (2.55)$$

o que estabelece a continuidade de $U_r |\phi\rangle$, visto que para todo positivo ϵ , existe uma vizinhança $\mathfrak{N}$ de r tal que $d_{r,s}(\phi) < \epsilon$ se $s \in \mathfrak{N}$.

Para completar a prova, consideremos agora um vetor unitário $|\varphi\rangle$ ortogonal a $|\phi\rangle$, e definamos $|\chi\rangle = (|\phi\rangle + |\varphi\rangle)/\sqrt{2}$. Note que

$$\langle U_r \phi | Z_{r,s}(\chi) \rangle = \langle U_r \phi | U_s \chi \rangle - \sigma_{r,s}(\chi) \langle U_r \phi | U_r \chi \rangle. \quad (2.56)$$

Somando e subtraindo $\langle U_s \phi | U_s \chi \rangle$, teremos

$$\langle U_r \phi | Z_{r,s}(\chi) \rangle = \langle U_r \phi - U_s \phi | U_s \chi \rangle + \langle U_s \phi | U_s \chi \rangle - \sigma_{r,s}(\chi) \langle U_r \phi | U_r \chi \rangle. \quad (2.57)$$

Dada a unitariedade da representação, temos

$$\langle U_s \phi | U_s \chi \rangle = \langle \phi | \chi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \phi | \phi + \varphi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (2.58)$$

então

$$\langle U_r \phi | Z_{r,s}(\chi) \rangle = \langle U_r \phi - U_s \phi | U_s \chi \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_{r,s}(\chi). \quad (2.59)$$

Podemos chegar mais uma vez a uma relação com $|1 - \sigma_{r,s}(\chi)|$:

$$1 - \sigma_{r,s}(\chi) = \sqrt{2} \{ \langle U_r \phi | Z_{r,s}(\chi) \rangle + \langle U_s \phi - U_r \phi | U_s \chi \rangle \} \quad (2.60)$$

e utilizar a relação (2.47), que deverá ainda ser válida:

$$\| U_s |\chi\rangle - U_r |\chi\rangle \|^2 \leq 2^{3/2} \{ |\langle U_r \phi | Z_{r,s}(\chi) \rangle| + |\langle U_s \phi - U_r \phi | U_s \chi \rangle| \}. \quad (2.61)$$

Mais uma vez, podemos analisar cada um dos termos, utilizando a desigualdade de Schwarz e os resultados já obtidos:

$$\| U_s |\chi\rangle - U_r |\chi\rangle \|^2 \leq 2^{3/2} \{ d_{r,s}(\chi) + \| U_s |\phi\rangle - U_r |\phi\rangle \| \}. \quad (2.62)$$

A continuidade de $U_r |\phi\rangle$, provada anteriormente, implicará então na continuidade de $U_r |\chi\rangle$

e também de $U_r |\varphi\rangle = \sqrt{2}U_r |\chi\rangle - U_r |\phi\rangle$. Provamos, assim, a continuidade para um vetor arbitrário $|\phi\rangle$, seu ortogonal $|\varphi\rangle$ e a soma destes $|\chi\rangle$. Seja então $|\psi\rangle = (\lambda_1 |\phi\rangle + \lambda_2 |\varphi\rangle)$, a continuidade de $U_r |\psi\rangle$ tal qual enunciada é garantida pela demonstração acima, bem como a continuidade para todo o conjunto. $\square$

Façamos agora observações adicionais referentes à prova.

1. Na prova acima, as propriedades específicas do grupo de G e as propriedades de representação de $\mathbf{U}_r$ não foram utilizadas. Logo, sempre que um conjunto $\mathbf{U}_r$ de raios operatórios depender continuamente de um elemento $r \in G$ tal qual a definição de forte continuidade, um conjunto de representativos admissíveis poderá ser selecionado em uma vizinhança adequada de um elemento arbitrário r_0 fixo (acima, utilizamos $r_0 = e$).
2. Note que, pela definição do produto de dois raios, $g_r = \Psi \cdot \mathbf{U}_r \Psi$ poderia, ou ainda, *deveria* ser definido como $\tilde{g}_r = |\langle \psi | U_r \psi \rangle|$ onde a condição $\tilde{g}_r > \alpha$ se mantém; podemos verificar que para fins da prova, a escolha da definição de g_r como feita não leva a perda de generalidade. Começemos reanalisando a expressão (2.43), agora sob um módulo:

$$|\langle \phi | Z_{r,s}(\phi) \rangle| = |\langle \phi | U_s \phi \rangle - \sigma_{r,s}(\phi) \langle \phi | U_r \phi \rangle|. \quad (2.63)$$

Para números complexos, temos a desigualdade triangular $|a - b| \geq |a| - |b|$. Assim

$$|\langle \phi | Z_{r,s}(\phi) \rangle| \geq |\langle \phi | U_s \phi \rangle| - |\sigma_{r,s}(\phi)| |\langle \phi | U_r \phi \rangle| \quad (2.64)$$

$$|\langle \phi | Z_{r,s}(\phi) \rangle| \geq \tilde{g}_s - |\sigma_{r,s}(\phi)| \tilde{g}_r. \quad (2.65)$$

Tal qual (2.46), temos da expressão acima

$$|1 - |\sigma_{r,s}(\phi)|| \leq \frac{1}{\alpha} \{|\tilde{g}_r - \tilde{g}_s| + |\langle \phi | Z_{r,s}(\phi) \rangle|\}. \quad (2.66)$$

Analisando o primeiro termo do lado direito da expressão acima, vemos que

$$|\tilde{g}_r - \tilde{g}_s| = ||\langle \psi | U_r \psi \rangle| - |\langle \psi | U_s \psi \rangle|| \leq |\langle \psi | U_r \psi \rangle - \langle \psi | U_s \psi \rangle| \leq |g_r - g_s|. \quad (2.67)$$

Então, diretamente de (2.52), $|\tilde{g}_r - \tilde{g}_s| \leq d_{r,s}(\phi)$. Como (2.53) também se mantém, então

$$|1 - |\sigma_{r,s}(\phi)|| \leq \frac{2}{\alpha} d_{r,s}(\phi). \quad (2.68)$$

Da expressão (2.47), devemos proceder com cautela mediante a definição de $\tilde{g}_r$, visto que $|1 - \sigma_{r,s}(\phi)| \geq |1 - |\sigma_{r,s}(\phi)||$, novamente pela desigualdade triangular para números complexos. Analisemos ambos os casos:

- i. $|1 - \sigma_{r,s}(\phi)| > |1 - |\sigma_{r,s}(\phi)||$ torna a análise inconclusiva, dado que não é possível comparar $||U_s |\phi\rangle - U_r |\phi\rangle||$ e $d_{r,s}(\phi)$ sob esta condição. Então, não é possível estabelecer a continuidade de $U_r |\phi\rangle$ dentro da vizinhança;

- ii. $|1 - \sigma_{r,s}(\phi)| = |1 - |\sigma_{r,s}(\phi)||$ nos leva a prova exatamente da mesma maneira, o que garante a continuidade de $U_r |\phi\rangle$.

Para um número qualquer $\alpha = \text{Re}(\alpha) + i\text{Im}(\alpha)$, $|\alpha| = \alpha$ se, e somente se, $\text{Re}(\alpha) \geq 0$ e $\text{Im}(\alpha) = 0$. Por definição $\sigma_{r,s}(\phi)$ é um número complexo, de modo que $|1 - \sigma_{r,s}(\phi)| = |1 - |\sigma_{r,s}(\phi)||$ se, e somente se, $\text{Re}(\sigma_{r,s}(\phi)) \geq 0$ e $\text{Im}(\sigma_{r,s}(\phi)) = 0$.

Relembrando a definição de $\sigma_{r,s}(\phi)$ e considerando as propriedades da representação, tem-se

$$\sigma_{r,s}(\psi) = \langle U_r \psi | U_s \psi \rangle = \langle \psi | U_r^{-1} U_s \psi \rangle. \quad (2.69)$$

Note então que $\sigma_{r,s}(\phi)$ é de fato uma função $g_m = \langle \phi | U_m \phi \rangle$, para $m = r^{-1}s \in \mathfrak{N}$, visto que ambos os elementos estão na vizinhança. Deste modo, a condição imposta para $\sigma_{r,s}(\phi)$ pode ser considerada também para g_r :

$$\text{Re}(g_r) \geq 0, \text{Im}(g_r) = 0 \implies \tilde{g}_r = g_r, \quad (2.70)$$

o que faz com que a definição de g_r tal qual enunciada no início da prova seja lícita e não altere a lógica da prova como um todo.

Até aqui, lidamos com representações unitárias de elementos de um dado grupo. É notável o interesse em operadores unitários visto que estes mantêm o produto interno inalterado e, consequentemente, mantêm a probabilidade de transição de um dado estado imutável após uma certa transformação; transformações que mantêm a probabilidade de um estado inalterada são chamadas comumente de transformações de simetria de um sistema. A seguir, provaremos que tanto operadores unitários quanto anti-unitários podem ser utilizados para a representação de tais transformações, combinados com a propriedade de linearidade ou anti-linearidade, respectivamente.

2.4 O TEOREMA DE WIGNER

Com o Teorema 1, provamos que os representativos U_r podem ser escolhidos em uma certa vizinhança de modo a serem contínuos; a continuidade dos operadores que representam um grupo é fundamental para conexão entre a formulação da teoria e sua conexão com observáveis. Agora, considere um certo grupo L de transformações de simetria de um sistema quântico, e sua representação de raio $\mathbf{U}$, com representativos U . Vamos suprimir a notação com subíndice relacionado a um elemento l do grupo L para melhor clareza.

Enunciamos agora o seguinte teorema, cuja prova por Wigner pode ser vista em (WIGNER; GRIFFIN, 1959):

Teorema 2. *Para toda transformação de simetria $\Psi \rightarrow \Psi'$, pode-se definir U no espaço de Hilbert, tal que se $|\psi\rangle$ é um representativo de Ψ , então $|\psi'\rangle = |U\psi\rangle$ é um representativo de Ψ' ,*

com U unitário e linear

$$\langle U\phi|U\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle, \quad (2.71)$$

$$U(\alpha|\phi\rangle + \beta|\psi\rangle) = \alpha U|\phi\rangle + \beta U|\psi\rangle, \quad (2.72)$$

ou antiunitário e antilinear

$$\langle U\phi|U\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*, \quad (2.73)$$

$$U(\alpha|\phi\rangle + \beta|\psi\rangle) = \alpha^* U|\phi\rangle + \beta^* U|\psi\rangle. \quad (2.74)$$

Prova: Aqui, seguiremos os passos apresentados em (WEINBERG, 1995), com observações estudadas em (BARGMANN, 1964). Lembremos que uma transformação de simetria T , por definição, mantém a densidade de probabilidade

$$|\langle\psi'_1|\psi'_2\rangle|^2 = |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2, \quad (2.75)$$

onde $|\psi_k\rangle \in \Psi_k$ são os vetores originais e $|\psi'_k\rangle \in \Psi'_k$ são vetores transformados. Vamos requerer que a transformação T tenha inversa, T^{-1} , que também seja uma transformação de simetria.

Considere um conjunto completo ortonormal de vetores de estado $\{|\psi_k\rangle\} \in \Psi$ e um conjunto de vetores transformados $\{|\psi'_k\rangle\} \in \Psi'$. Assim

$$|\langle\psi'_l|\psi'_k\rangle|^2 = |\langle\psi_l|\psi_k\rangle|^2 = \delta_{lk}. \quad (2.76)$$

Abrindo a definição do módulo de um número complexo, temos simplesmente

$$\langle\psi'_l|\psi'_k\rangle^* \langle\psi'_l|\psi'_k\rangle = \delta_{lk}. \quad (2.77)$$

É postulado que $\langle\psi'_k|\psi'_k\rangle \geq 0$, de modo que podemos escrever $\langle\psi'_k|\psi'_k\rangle = n \in \mathbb{R}^+$. Assim, para $k = l$:

$$\langle\psi'_k|\psi'_k\rangle \langle\psi'_k|\psi'_k\rangle = 1 \implies n^2 = 1. \quad (2.78)$$

Similarmente, para $k \neq l$:

$$\langle\psi'_l|\psi'_k\rangle^* \langle\psi'_l|\psi'_k\rangle = 0. \quad (2.79)$$

Considerando que $\langle\psi'_l|\psi'_k\rangle$ pode ser escrito como um número complexo $a + ib$, $a, b \in \mathbb{R}$, temos

$$(a - ib)(a + ib) = 0 \implies a^2 + b^2 = 0. \quad (2.80)$$

Como $a^2 > 0$ e $b^2 > 0$, a equação acima é possível apenas para $a = b = 0$. Então

$$\langle\psi'_l|\psi'_k\rangle = 0. \quad (2.81)$$

Vemos então que a transformação preserva a ortonormalidade. Vejamos agora se $\{|\psi'_k\rangle\} \in \Psi'$ é de fato um conjunto completo; se $\{|\psi'_k\rangle\}$ não o for, existirá $|\psi'\rangle \in \Psi'$ que não possui projeção no conjunto, ou seja, $\langle\psi'|\psi'_k\rangle = 0$. Se isso acontece

$$|\langle\psi'|\psi'_k\rangle|^2 = 0. \quad (2.82)$$

Pela transformação inversa, isso implicaria

$$|\langle\psi'|\psi'_k\rangle|^2 = |\langle\psi|\psi_k\rangle|^2 = 0, \quad (2.83)$$

o que não é possível, visto que $\{|\psi_k\rangle\}$ é um conjunto completo. Logo, $\{|\psi'_k\rangle\}$ também o é e a transformação leva base em base.

Agora, escolhamos um elemento de $\{|\psi_k\rangle\}$, por exemplo $|\psi_1\rangle$, e definamos

$$|\phi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle + |\psi_k\rangle), \quad k \neq 1, \quad (2.84)$$

com $\phi_k \in \Phi_k$. Como observado, a transformação preserva a ortonormalidade e completeza, então qualquer vetor transformado $|\phi'_k\rangle \in \Phi'_k$ pode ser escrito como:

$$|\phi'_k\rangle = \sum_l C_{kl} |\psi'_l\rangle. \quad (2.85)$$

Observemos então as densidades de probabilidade da projeção de tal vetor $|\phi_k\rangle$ no estado arbitrário $|\psi_k\rangle$, e também de $|\phi'_k\rangle$ em $|\psi'_k\rangle$:

$$|\langle\psi_k|\phi_k\rangle|^2 = \left| \langle\psi_k| \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle + |\psi_k\rangle) \rangle \right|^2 = \frac{1}{2} |\langle\psi_k|\psi_1\rangle + \langle\psi_k|\psi_k\rangle|^2. \quad (2.86)$$

Pela ortonormalidade do conjunto, temos

$$|\langle\psi_k|\phi_k\rangle|^2 = \frac{1}{2}. \quad (2.87)$$

Agora, para os vetores transformados

$$|\langle\psi'_k|\phi'_k\rangle|^2 = \left| \langle\psi_k| \sum_l C_{kl} \psi'_l \rangle \right|^2. \quad (2.88)$$

Pela linearidade na segunda entrada do produto interno, reescrevemos

$$|\langle\psi'_k|\phi'_k\rangle|^2 = \left| \sum_l C_{kl} \langle\psi_k|\psi'_l\rangle \right|^2, \quad (2.89)$$

onde $\langle \psi_k | \psi'_l \rangle = \delta_{kl}$ e então

$$|\langle \psi'_k | \phi'_k \rangle|^2 = |C_{kk}|^2. \quad (2.90)$$

De (2.75) e (2.87), temos

$$|C_{kk}| = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (2.91)$$

e particularmente, $|\langle \psi_1 | \phi_k \rangle|^2 = \frac{1}{2}$ e também, $|C_{k1}| = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Pelo mesmo procedimento para $l \neq k$ e $l \neq 1$, vemos

$$|\langle \psi_l | \phi_k \rangle|^2 = \left| \langle \psi_l | \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle + |\psi_k\rangle) \rangle \right|^2 \implies |\langle \psi_l | \phi_k \rangle|^2 = 0 \quad (2.92)$$

e similarmente para os vetores transformados:

$$|\langle \psi'_l | \phi'_k \rangle|^2 = \left| \langle \psi_l | \sum_m C_{km} \psi'_m \rangle \right|^2 \implies |\langle \psi'_l | \phi'_k \rangle|^2 = |C_{kl}|^2. \quad (2.93)$$

Então, ficamos com

$$|C_{kl}| = 0. \quad (2.94)$$

Podemos então ajustar os vetores $|\phi'_k\rangle$ e $|\psi'_k\rangle$ de modo que $|C_{kk}| = |C_{k1}| = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Utilizemos da notação $|\phi'_k\rangle = |U\phi_k\rangle$, bem como $|\psi'_k\rangle = |U\psi_k\rangle$ e assim:

$$|U\phi_k\rangle = U \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle + |\psi_k\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|U\psi_1\rangle + |U\psi_k\rangle). \quad (2.95)$$

A escolha dos coeficientes $|C_{kk}| = |C_{k1}| = \frac{1}{\sqrt{2}}$ não altera a lógica da prova a seguir, visto que todos os outros coeficientes C_{kl} ($l \neq k$ e $l \neq 1$) da expansão em (2.85) são nulos conforme prova acima.

Vamos de agora em diante estender tal definição para todo o espaço de Hilbert, analisando como se comportam os coeficientes e os próprios vetores da base transformados. Seja $|\psi\rangle = \sum_k C_k |\psi_k\rangle$. Como $\{|\psi'_k\rangle\} = \{|U\psi_k\rangle\}$ é um conjunto ortonormal completo, temos

$$|\psi'\rangle = \sum_k C'_k |\psi'_k\rangle = \sum_k C'_k |U\psi_k\rangle. \quad (2.96)$$

Pelo mesmo processo anterior

$$|\langle \psi_k | \psi \rangle|^2 = \left| \langle \psi_k | \sum_m C_m \psi_m \rangle \right|^2 \implies |\langle \psi_k | \psi \rangle|^2 = |C_k|^2, \quad (2.97)$$

o que também vale para os vetores transformados:

$$|\langle \psi'_k | \psi' \rangle|^2 = \left| \langle U\psi_k | \sum_m C'_m U\psi_m \rangle \right|^2 \implies |\langle U\psi_k | U\psi \rangle|^2 = |C'_k|^2. \quad (2.98)$$

Assim, por (2.75), temos

$$|C_k|^2 = |C'_k|^2, \quad \forall k, \quad (2.99)$$

em particular, $|C_1|^2 = |C'_1|^2$. Assim

$$\frac{|C_k|^2}{|C_1|^2} = \frac{|C'_k|^2}{|C'_1|^2} \rightarrow \left| \frac{C_k}{C_1} \right|^2 = \left| \frac{C'_k}{C'_1} \right|^2. \quad (2.100)$$

Agora, podemos verificar que

$$|\langle \phi_k | \psi \rangle|^2 = \left| \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle + |\psi_k\rangle) \middle| \sum_m C_m \psi_m \right\rangle \right|^2. \quad (2.101)$$

Rearranjando o produto e utilizando resultados anteriores, temos

$$|\langle \phi_k | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{2} |C_1 + C_k|^2. \quad (2.102)$$

Pelo exato mesmo procedimento, chegamos em uma relação similar para os vetores e coeficientes transformados

$$|\langle \phi'_k | \psi' \rangle|^2 = \frac{1}{2} |C'_1 + C'_k|^2. \quad (2.103)$$

Novamente, observando (2.75), temos

$$|C_1 + C_k|^2 = |C'_1 + C'_k|^2. \quad (2.104)$$

Também quocientando esta expressão por $|C'_1|^2$ e lembrando que $|C_1|^2 = |C'_1|^2$, ficamos com a relação

$$\frac{|C_1 + C_k|^2}{|C_1|^2} = \frac{|C'_1 + C'_k|^2}{|C'_1|^2} \implies \left| 1 + \frac{C_k}{C_1} \right|^2 = \left| 1 + \frac{C'_k}{C'_1} \right|^2. \quad (2.105)$$

Como estamos sempre supondo coeficientes complexos, podemos reescrever as razões C_k/C_1 e C'_k/C'_1 como $a + ib$ e $a' + ib'$, respectivamente. Assim, temos de (2.100) e de (2.105):

$$a^2 + b^2 = a'^2 + b'^2 \quad (2.106)$$

$$(1 + a)^2 + b^2 = (1 + a')^2 + b'^2. \quad (2.107)$$

Manipulando as expressões acima, chegamos em $a = a' \implies b = \pm b'$. Assim:

$$\operatorname{Re} \left(\frac{C_k}{C_1} \right) = \operatorname{Re} \left(\frac{C'_k}{C'_1} \right), \quad (2.108)$$

$$\operatorname{Im} \left(\frac{C_k}{C_1} \right) = \pm \operatorname{Im} \left(\frac{C'_k}{C'_1} \right), \quad (2.109)$$

o que só ocorrerá em dois casos:

$$\frac{C_k}{C_1} = \frac{C'_k}{C'_1}, \quad (2.110)$$

ou

$$\frac{C_k}{C_1} = \frac{C_k^*}{C_1^*}. \quad (2.111)$$

Podemos mostrar que uma destas escolhas deve ser feita para todo k . Suponha que para um dado k , temos $C_k/C_1 = C'_k/C'_1$ e que, para um $l \neq k$, temos $C_l/C_1 = (C'_l/C'_1)^*$. Considere que ambas as razões são complexas, então temos de fato casos diferentes (o que requer também $k \neq 1$ e $l \neq 1$); provaremos que isto é impossível para uma mesma transformação e, de fato, que uma mesma escolha deve ser feita para todos os coeficientes.

Defina um vetor de estado $|\varphi\rangle$ e o vetor transformado $|\varphi'\rangle$:

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|\psi_1\rangle + |\psi_k\rangle + |\psi_l\rangle), \quad (2.112)$$

$$|\varphi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|U\psi_1\rangle + |U\psi_k\rangle + |U\psi_l\rangle). \quad (2.113)$$

Novamente

$$|\langle\varphi|\psi\rangle|^2 = \left| \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}}(|\psi_1\rangle + |\psi_k\rangle + |\psi_l\rangle) \middle| \sum_m C_m \psi_m \right\rangle \right|^2 = \frac{1}{3} |C_1 + C_k + C_l|^2 \quad (2.114)$$

e para os vetores e coeficientes transformados

$$|\langle\varphi'|\psi'\rangle|^2 = \left| \left\langle \frac{1}{\sqrt{3}}(|U\psi_1\rangle + |U\psi_k\rangle + |U\psi_l\rangle) \middle| \sum_m C'_m U\psi_m \right\rangle \right|^2 = \frac{1}{3} |C'_1 + C'_k + C'_l|^2. \quad (2.115)$$

Ainda mais uma vez

$$|C_1 + C_k + C_l|^2 = |C'_1 + C'_k + C'_l|^2. \quad (2.116)$$

Lembrando que $|C_k|^2 = |C'_k|^2, \forall k$, podemos quocientar a expressão acima por $|C_1|^2$ e teremos

$$\left| 1 + \frac{C_k}{C_1} + \frac{C_l}{C_1} \right|^2 = \left| 1 + \frac{C'_k}{C'_1} + \frac{C'_l}{C'_1} \right|^2. \quad (2.117)$$

Utilizando a hipótese desta seção da prova, podemos tentar fazer ambas as escolhas (2.110) e (2.111) simultaneamente, de modo que temos a relação:

$$\left|1 + \frac{C_k}{C_1} + \frac{C_l}{C_1}\right|^2 = \left|1 + \frac{C_k}{C_1} + \frac{C_l^*}{C_1^*}\right|^2. \quad (2.118)$$

Disto, podemos expandir o módulo de ambos os lados da igualdade, lembrando que estamos, por hipótese, trabalhando com coeficientes complexos. Chegamos então em:

$$\frac{C_k C_l^*}{C_1 C_1^*} + \frac{C_k^* C_l}{C_1^* C_1} = \frac{C_k C_l}{C_1 C_1} + \frac{C_k^* C_l^*}{C_1^* C_1^*}. \quad (2.119)$$

Definamos $A = C_k C_l^* / C_1 C_1^*$ e $B = C_k C_l / C_1 C_1$, e assim temos, da relação acima,

$$A + A^* = B + B^* \implies \operatorname{Re}\left(\frac{C_k C_l^*}{C_1 C_1^*}\right) = \operatorname{Re}\left(\frac{C_k C_l}{C_1 C_1}\right). \quad (2.120)$$

Considere $u = u_1 + iu_2 = C_k/C_1$ e $v = v_1 + iv_2 = C_l/C_1$, então podemos reescrever a relação acima como:

$$\operatorname{Re}(uv^*) = \operatorname{Re}(uv) \quad (2.121)$$

onde o lado esquerdo é

$$\operatorname{Re}[(u_1 + iu_2)(v_1 - iv_2)] = u_1 v_1 + u_2 v_2 \quad (2.122)$$

e o lado direito:

$$\operatorname{Re}[(u_1 + iu_2)(v_1 + iv_2)] = u_1 v_1 - u_2 v_2. \quad (2.123)$$

Vemos então que (2.120) só será válida se $u_2 = v_2 = 0$, ou seja, se as razões C_k/C_1 e C_l/C_1 forem números puramente reais. Isto contradiz a hipótese inicial, mostrando então que é impossível obter ambos os casos de um mesmo conjunto de coeficientes, ou ainda, de uma mesma transformação.

Assim, dado um vetor $|\psi\rangle = \sum_k C_k |\psi_k\rangle$, os coeficientes C'_k da transformação $|\psi'\rangle = \sum_k C'_k |U\psi_k\rangle$ devem obedecer uma das duas escolhas. Consideremos ambos os casos na atuação do operador U em uma combinação linear dos vetores $|\alpha\rangle = \sum_k A_k |\psi_k\rangle$ e $|\beta\rangle = \sum_k B_k |\phi_k\rangle$, considerando coeficientes complexos como fizemos até aqui:

$$\text{i. } U(\sum_k C_k |\psi_k\rangle) = \sum_k C_k |U\psi_k\rangle$$

$$U(\sigma |\alpha\rangle + \tau |\beta\rangle) = U \sum_k (\sigma A_k |\psi_k\rangle + \tau B_k |\phi_k\rangle). \quad (2.124)$$

Pela propriedade da atuação de U para este caso, temos

$$U(\sigma |\alpha\rangle + \tau |\beta\rangle) = \sigma \sum_k A_k |U\psi_k\rangle + \tau \sum_k B_k |U\phi_k\rangle. \quad (2.125)$$

Logo

$$U(\sigma |\alpha\rangle + \tau |\beta\rangle) = \sigma |U\alpha\rangle + \tau |U\beta\rangle, \quad (2.126)$$

o que garante a linearidade da atuação do operador. Analisemos também

$$\langle U\alpha | U\beta \rangle = \langle U \sum_k A_k |\psi_k\rangle | U \sum_l B_l |\phi_l\rangle \rangle. \quad (2.127)$$

Rearranjamos o produto abaixo de acordo com a propriedade de sesquilinearidade do produto interno e da atuação do operador conforme considerada nesta seção:

$$\langle U\alpha | U\beta \rangle = \sum_{k,l} A_k^* B_l \langle U\psi_k | U\phi_l \rangle = \sum_{k,l} A_k^* B_l \delta_{kl}. \quad (2.128)$$

Finalmente, evidenciamos também a unitariedade, isto é

$$\langle U\alpha | U\beta \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle. \quad (2.129)$$

Assim, U é linear e unitário.

ii. $U(\sum_k C_k |\psi_k\rangle) = \sum_k C_k^* |U\psi_k\rangle$

$$U(\sigma |\alpha\rangle + \tau |\beta\rangle) = U \sum_k (\sigma A_k |\psi_k\rangle + \tau B_k |\phi_k\rangle). \quad (2.130)$$

Mais uma vez pela propriedade da atuação de U para este caso, temos

$$U(\sigma |\alpha\rangle + \tau |\beta\rangle) = \sigma^* \sum_k A_k^* |U\psi_k\rangle + \tau^* \sum_k B_k^* |U\phi_k\rangle. \quad (2.131)$$

Logo

$$U(\sigma |\alpha\rangle + \tau |\beta\rangle) = \sigma^* |U\alpha\rangle + \tau^* |U\beta\rangle, \quad (2.132)$$

o que garante a antilinearidade da atuação do operador. Analisemos também

$$\langle U\alpha | U\beta \rangle = \langle U \sum_k A_k |\psi_k\rangle | U \sum_l B_l |\phi_l\rangle \rangle. \quad (2.133)$$

Rearranjamos o produto abaixo de acordo com a propriedade de sesquilinearidade do

produto interno e da atuação do operador conforme considerada nesta seção:

$$\langle U\alpha|U\beta\rangle = \sum_{k,l} A_k B_l^* \langle U\psi_k|U\phi_l\rangle = \sum_{k,l} A_k B_l^* \delta_{kl}. \quad (2.134)$$

Finalmente, evidenciamos também a antiunitariedade:

$$\langle U\alpha|U\beta\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*. \quad (2.135)$$

Então, U é antilinear e antiunitário. $\square$

Observe que tanto o caso linear e unitário, quanto o caso antilinear e antiunitário, mantém a densidade de probabilidade:

i. Linear e unitário:

$$|\langle U\psi_1|U\psi_2\rangle|^2 = \langle U\psi_2|U\psi_1\rangle \langle U\psi_1|U\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle \langle\psi_1|\psi_2\rangle = |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2. \quad (2.136)$$

ii. Antilinear e antiunitário:

$$|\langle U\psi_1|U\psi_2\rangle|^2 = \langle U\psi_2|U\psi_1\rangle \langle U\psi_1|U\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^* \langle\psi_1|\psi_2\rangle^* = |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2, \quad (2.137)$$

ou seja, em ambos os casos, temos representações de transformações de simetria.

Operadores que representam transformações em um sistema quântico, como dito anteriormente, relacionam quantidades ou grandezas reais e os cálculos abstratos. Como já provamos a continuidade destas representações, tratemos agora de certas condições e propriedades dos operadores em relação a seus autovalores e autoestados.

3 HERMITICIDADE E PSEUDO-HERMITICIDADE

3.1 NOÇÕES INTRODUTÓRIAS

Para esta seção, comecemos com algumas definições preliminares para que possamos falar sobre o conceito de Hermiticidade. Até agora, consideramos todas as nossas definições e operações em um espaço vetorial complexo $\mathcal{H}$, o espaço de Hilbert, sem darmos uma definição formal para o mesmo e para o produto nele definido. Façamos isto agora:

Considere um espaço vetorial $\mathcal{H}$ construído sobre o corpo dos complexos, dotado de um produto $\langle \cdot | \cdot \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ que associa a cada par de vetores $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ um número complexo $\langle \psi | \phi \rangle$ ¹. Tal produto aqui definido tem as seguintes propriedades, como enunciadas em (MOSTAFAZADEH, 2010):

1. Para todo elemento não-nulo $|\psi\rangle$ de $\mathcal{H}$, $\langle \psi | \psi \rangle$ é um número positivo e real, e será nulo se, e somente se, $|\psi\rangle = |0\rangle$ (produto positivo-definido);
2. Para cada par de elementos $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ de $\mathcal{H}$, $\langle \psi | \phi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle^*$ (produto Hermiteano);
3. Para todo elemento $|\psi\rangle, |\phi\rangle, |\chi\rangle$ de $\mathcal{H}$, e todo $a, b, c \in \mathbb{C}$, $\langle a\psi | b\phi + c\chi \rangle = a^*b \langle \psi | \phi \rangle + a^*c \langle \psi | \chi \rangle$ (produto sesquilinear).

Dada uma base $\{|\chi_n\rangle\}$ de um espaço de Hilbert, pode-se construir uma base ortonormal para este espaço $\{|\xi_n\rangle\}$ que satisfaça:

$$\langle \xi_m | \xi_n \rangle = \delta_{mn}, \quad \forall m, n \in \{1, 2, 3, \dots, N\} \quad (3.1)$$

onde δ_{mn} é a delta de Kronecker. Um vetor arbitrário pode então ser expandido em termos desta base

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |\xi_n\rangle, \quad (3.2)$$

o que também nos leva à relação para o coeficiente complexo da expansão c_n , atuando com o elemento dual $\langle \xi_n |$:

$$c_n = \langle \xi_n | \psi \rangle. \quad (3.3)$$

Note, como se sabe, que o produto $\langle \psi | \phi \rangle$ pode ser escrito como

$$\langle \psi | \phi \rangle = \sum_{m=1}^N b_m^* \langle \xi_m | \sum_{n=1}^N c_n |\xi_n\rangle. \quad (3.4)$$

¹ Note que, como uma definição adicional, podemos definir um espaço vetorial dual $\mathcal{H}^*$ complexo, com aplicações $\langle \psi |$ que levarão um elemento $|\phi\rangle$ de seu espaço vetorial usual para o corpo dos complexos: $|\phi\rangle \mapsto \langle \psi | \phi \rangle \in \mathbb{C}$.

Dada a sesquilinearidade do produto interno, temos:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N b_m^* c_n \langle \xi_m | \xi_n \rangle \quad (3.5)$$

e considerando a base ortonormal e a relação para os coeficientes expressada acima, temos:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \sum_{n=1}^N \langle \psi | \xi_n \rangle \langle \xi_n | \phi \rangle, \quad (3.6)$$

de onde obtemos a relação de completeza ou de fechamento

$$\sum_{n=1}^N |\xi_n\rangle \langle \xi_n| = \mathbb{I}, \quad (3.7)$$

onde $\mathbb{I}$ será identificado como o operador identidade.

Com estas definições sobre o espaço no qual construímos a teoria, passemos a definir o que é a Hermiticidade de um operador e sua relação com o produto interno de um dado espaço vetorial.

3.2 HERMITICIDADE E O PRODUTO INTERNO

Consideremos o espaço vetorial complexo $\mathcal{H}$ com vetores $|\psi_n\rangle$ e um operador $O : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. A conjugação hermiteana é uma operação definida por:

$$\langle \psi_1 | O^\dagger | \psi_2 \rangle := \langle \psi_2 | O | \psi_1 \rangle^*, \quad (3.8)$$

onde $O^\dagger = (O^T)^*$ corresponde à transposição e conjugação complexa da representação matricial de tal operador. Um operador será considerado Hermiteano ou autoadjunto² se $\langle \psi_1 | O | \psi_2 \rangle^* = \langle \psi_2 | O | \psi_1 \rangle$. Note que a própria definição de conjugação hermiteana de um operador é ligada ao produto interno do espaço no qual este é definido, ainda que uma possível representação matricial do operador exija a escolha de uma base; mostremos que tal definição de fato não depende da base escolhida para a representação e sim, somente, do produto.

Considere um certo operador $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ e também seu conjugado hermiteano $B = A^\dagger$. Então, o operador A terá uma representação matricial em uma certa base ortonormal χ , $[A]_\chi$, bem como seu conjugado hermiteano, $[B]_\chi$, na mesma base; logo, $[B]_\chi = [A]_\chi^\dagger$. Agora, façamos uma mudança de base nestas representações matriciais para uma outra base ortonormal ξ via transformação de similaridade

$$[B]_\xi = U^{-1} [B]_\chi U. \quad (3.9)$$

² O termo “autoadjunto” se dá se $O : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ com mesmo domínio de aplicação no espaço de Hilbert. Aqui usaremos, sem rigor adicional, ambos os termos.

De (BUTKOV, 1973), uma matriz de transformação que relaciona bases ortogonais é unitária, de modo que $U^{-1} = U^\dagger$. Deste modo, podemos reescrever a relação acima como

$$[B]_\xi = U^\dagger [B]_\chi U = U^\dagger [A]_\chi^\dagger U. \quad (3.10)$$

Considere agora a mesma mudança de base na representação matricial de A :

$$[A]_\xi = U^\dagger [A]_\chi U \quad (3.11)$$

e a conjugação hermiteana desta expressão, considerando como a operação de transposição se dá para um produto de matrizes:

$$[A]_\xi^\dagger = (U^\dagger [A]_\chi U)^\dagger = U^\dagger [A]_\chi^\dagger U \therefore [B]_\xi = [A]_\xi^\dagger. \quad (3.12)$$

Vemos então que, partindo da premissa que $B = A^\dagger$ em uma representação na base χ , tal igualdade se mantém para uma outra base ortogonal qualquer. Assim, é mais comum utilizar a definição da conjugação hermiteana via produto, que independe da base escolhida.

A Hermiticidade de um operador que representa uma transformação ou um fenômeno físico é notavelmente requerida, principalmente dadas as seguintes propriedades:

- i. Os autovalores de um operador Hermiteano são reais;
- ii. Os autoestados de um operador Hermiteano com autovalores distintos são ortogonais;
- iii. Os autoestados de um operador Hermiteano formam o espaço vetorial ao qual os autoestados pertencem.

Em geral, estas três propriedades tem grande relevância, visto que autovalores reais nos garantem a obtenção de valores possíveis para medidas de uma certa grandeza, enquanto a ortogonalidade dos autoestados e o fato destes formarem o espaço vetorial nos permitirão representar um estado qualquer como uma combinação linear destes autoestados; os autoestados de um operador Hermiteano formam um conjunto completo.

Mais especificamente, a Hermiticidade de um operador que seja gerador de uma transformação, como por exemplo a Hamiltoniana, garante a unitariedade da representação desta transformação. Como visto na seção anterior, uma transformação de simetria pode ser representada por operadores unitários, e logo, Hermiteanos³.

Ainda que a Hermiticidade seja desejada, trabalhos como (BENDER; BOETTCHER, 1998) e outros subsequentes exploram a ideia de condições mais fracas que a Hermiticidade como garantia de um espectro real, tal qual uma Hamiltoniana com simetria por paridade e inversão temporal (simetria $\mathcal{PT}$), ou a adequação do produto interno para a formulação de uma teoria unitária (produto $\mathcal{CPT}$). Os estudos sobre sistemas com simetria $\mathcal{CPT}$ dentro da Mecânica Quântica levaram à inconsistências teóricas, como um observável com tal simetria se tornar

³ De fato, caso nos restrinjamos à componente conexa do grupo representado, basta se utilizar operadores unitários (BARGMANN, 1954).

“não-observável” após evolução temporal, fazendo com que as simetrias $\mathcal{PT}$ sejam mais estudadas desde então como uma exigência física e não apenas algébrica, como é a Hermiticidade, para a realidade do espectro. Exploreemos na seção seguinte uma ideia de *generalização* das teorias $\mathcal{PT}$ -simétricas, chamada Mecânica Quântica Pseudo-Hermiteana.

3.3 PSEUDO-HERMITICIDADE E CONJUGAÇÃO PSEUDO-HERMITEANA

A partir das definições apresentadas em (MOSTAFAZADEH, 2002a) e (MOSTAFAZADEH, 2010), começaremos a definir agora a *pseudo-Hermiticidade*. Analogamente à conjugação Hermiteana, representada por $\dagger$, começemos definindo a operação $\sharp$, ou *conjugação pseudo-Hermiteana*:

Definição 1. *Sejam $\mathcal{H}_\pm$ dois espaços vetoriais dotados de automorfismos⁴ lineares Hermiteanos $\eta_\pm$ (operadores invertíveis que mapeiam $\mathcal{H}_\pm$ a si mesmo e satisfazem $(\psi_\pm \eta_\pm, \phi_\pm)_\pm = (\eta_\pm \psi_\pm, \phi_\pm)_\pm, \forall \psi_\pm, \phi_\pm \in \mathcal{H}_\pm$, onde $(\cdot, \cdot)_\pm$ denota o produto interno em $\mathcal{H}_\pm$) e $O : \mathcal{H}_+ \rightarrow \mathcal{H}_-$ um operador linear. Então o adjunto $\eta_\pm$ -pseudo-Hermiteano $O^\sharp : \mathcal{H}_- \rightarrow \mathcal{H}_+$ de O é definido como $O^\sharp = \eta_+^{-1} O^\dagger \eta_-$. Em particular, para $\mathcal{H}_\pm = \mathcal{H}$ e $\eta_\pm = \eta$, o operador O é dito η -pseudo-Hermiteano se $O^\sharp = O$.*

Aqui, chamaremos o operador η de operador *pseudo-métrica*; exploraremos com mais detalhes a definição de η na seção seguinte, visto que esta está diretamente ligada à definição do produto interno do espaço. Para uma definição mais sucinta da pseudo-Hermiticidade:

Definição 2. *Seja $\mathcal{H}$ um espaço de produto interno. Então um operador $O : V \rightarrow V$ é dito pseudo-Hermiteano se existe um automorfismo linear Hermiteano η tal que O é η -pseudo-Hermiteano.*

Com as proposições que seguem, investigaremos algumas propriedades e consequências da pseudo-Hermiticidade e da conjugação pseudo-Hermiteana, sem ainda atentarmos à forma do produto interno definido no espaço vetorial.

Proposição 1. *Seja $\mathcal{H}$ um espaço de produto interno dotado de um automorfismo linear Hermiteano η . $\mathbb{I} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ denota o operador identidade, $O_1, O_2 : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ operadores lineares e $z_1, z_2 \in \mathbb{C}$. Então:*

- (a) $\mathbb{I}^\sharp = \mathbb{I}$;
- (b) $(O_1^\sharp)^\sharp = O_1$;
- (c) $(z_1 O_1 + z_2 O_2)^\sharp = z_1^* O_1^\sharp + z_2^* O_2^\sharp$;

onde z_i^* denota o complexo conjugado de z_i .

⁴ Um automorfismo é um homomorfismo bijetor α de um grupo G em si mesmo $\alpha : G \rightarrow G$; um homomorfismo por sua vez é uma função $\phi : G \rightarrow H$ tal que $\phi(ab) = \phi(a)\phi(b) \forall a, b \in G$. (BARATA, 2024)

Prova: Os itens (a) e (b) são consequências triviais da definição de $\sharp$ e da Hermiticidade de η :

$$\mathbb{I}^\sharp = \eta^{-1} \mathbb{I}^\dagger \eta \rightarrow \mathbb{I}^\sharp = \eta^{-1} \eta = \mathbb{I}, \quad (3.13)$$

$$(O_1^\sharp)^\sharp = \eta^{-1} (\eta^{-1} O_1^\dagger \eta)^\dagger \eta \rightarrow (O_1^\sharp)^\sharp = \eta^{-1} \eta O_1 \eta^{-1} \eta = O_1. \quad (3.14)$$

Já o item (c) parte da mesma definição de $\sharp$ e da linearidade de η e η^{-1} :

$$(z_1 O_1 + z_2 O_2)^\sharp = \eta^{-1} (z_1 O_1 + z_2 O_2)^\dagger \eta \quad (3.15)$$

$$= \eta^{-1} (z_1^* O_1^\dagger + z_2^* O_2^\dagger) \eta \quad (3.16)$$

$$= z_1^* \eta^{-1} O_1^\dagger \eta + z_2^* \eta^{-1} O_2^\dagger \eta = z_1^* O_1^\sharp + z_2^* O_2^\sharp. \quad \square \quad (3.17)$$

Proposição 2. *Sejam $\mathcal{H}_i$, com $i \in \{1, 2, 3\}$, espaços de produto interno dotados de automorfismos lineares Hermiteanos η_i e sejam $O_1 : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$, $O_2 : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_3$ operadores lineares. Então $(O_2 O_1)^\sharp = O_1^\sharp O_2^\sharp$.*

Prova: Lembremos a definição da conjugação pseudo-Hermiteana para $O : \mathcal{H}_+ \rightarrow \mathcal{H}_-$:

$$O^\sharp = \eta_+^{-1} O^\dagger \eta_-. \quad (3.18)$$

Então, para os operadores O_1 e O_2 , temos a seguinte conjugação

$$O_1^\sharp = \eta_1^{-1} O_1^\dagger \eta_2, \quad (3.19)$$

$$O_2^\sharp = \eta_2^{-1} O_2^\dagger \eta_3. \quad (3.20)$$

Notemos que a atuação de $O_2 O_1$ é da maneira que $O_2 O_1 : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_3$, e em observação à definição de $\sharp$, teremos

$$(O_2 O_1)^\sharp = \eta_1^{-1} (O_2 O_1)^\dagger \eta_3 \quad (3.21)$$

$$= \eta_1^{-1} O_1^\dagger O_2^\dagger \eta_3. \quad (3.22)$$

Podemos adicionar uma identidade escrita de maneira conveniente na expressão acima, $\mathbb{I} = \eta_2 \eta_2^{-1}$, e assim obter

$$(O_2 O_1)^\sharp = (\eta_1^{-1} O_1^\dagger \eta_2) (\eta_2^{-1} O_2^\dagger \eta_3) = O_1^\sharp O_2^\sharp. \quad \square \quad (3.23)$$

Corolário 1. *A conjugação pseudo-Hermiteana é uma operação de dualidade.*

Prova: De acordo com as Proposições 1 e 2, a conjugação pseudo-hermiteana tem todas as propriedades de uma operação de dualidade: mantém a identidade, é involutiva, anti-linear e mantém a propriedade “anti-distributiva” da transposição do produto de matrizes $(AB)^T = B^T A^T$. Nota-se que a conjugação hermiteana usual também é uma operação de dualidade, então tais propriedades se mantêm. $\square$

Proposição 3. *Sejam $\mathcal{H}$ um espaço de produto inteiro dotado de um automorfismo linear Hermiteano η , $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ um operador unitário e $O : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ um operador linear. Então $\eta_U := U^\dagger \eta U$ é um automorfismo linear Hermiteano, e O é η -pseudo-Hermiteano se, e somente se, $O_U := U^\dagger O U$ é η_U -pseudo-Hermiteano. Em outras palavras, a noção de pseudo-Hermiticidade é unitariamente invariante.*

Prova: Primeiro, notemos a hermiticidade de η_U é diretamente herdada da hermiticidade de η :

$$\eta_U^\dagger = (U^\dagger \eta U)^\dagger = U^\dagger \eta^\dagger U = U^\dagger \eta U = \eta_U \quad (3.24)$$

e o mesmo ocorre para provar que η_U é invertível:

$$\det(\eta_U) = \det(U^{-1} \eta U) = \det(U^{-1}) \det(\eta) \det(U) \quad (3.25)$$

$$= \det(U)^{-1} \det(\eta) \det(U) \quad (3.26)$$

$$\det(\eta_U) = \det(\eta) \neq 0 \implies \exists \eta_U^{-1}. \quad (3.27)$$

Podemos escrever as relações $\eta = U \eta_U U^\dagger$ e $O = U O_U U^\dagger$, devido a unitariedade de U . Então, verifiquemos a conjugação pseudo-Hermiteana de O com base nestas relações acima:

$$O^\# = \eta^{-1} O^\dagger \eta = (U \eta_U U^\dagger)^{-1} (U O_U U^\dagger)^\dagger U \eta_U U^\dagger. \quad (3.28)$$

Abrindo cada um dos termos, respeitando as propriedades de transposição e inversa de cada matriz, temos

$$O^\# = U \eta_U^{-1} U^\dagger U O_U^\dagger U^\dagger U \eta_U U^\dagger \quad (3.29)$$

e assim, lembrando que $U^\dagger U = \mathbb{I}$,

$$O^\# = U(\eta_U^{-1} O_U^\dagger \eta_U) U^\dagger. \quad (3.30)$$

Reconhecemos assim a definição de $O_U^\#$ pelos moldes do teorema que define a conjugação pseudo-hermiteana, nos resultando na relação:

$$O^\# = U O_U^\# U^\dagger. \quad (3.31)$$

Note que $O^\# = O$ se $O_U^\# = O_U$, que é a condição de η_U -pseudo-Hermiticidade para $O_U^\#$. Agora, analisemos também a conjugação pseudo-Hermiteana de O_U pelo mesmo procedimento:

$$O_U^\# = \eta_U^{-1} (U^\dagger O U)^\dagger \eta_U = (U^\dagger \eta U)^{-1} (U^\dagger O U)^\dagger U^\dagger \eta U \rightarrow O_U^\# = U^\dagger O^\# U. \quad (3.32)$$

Vemos que da mesma forma, $O_U^\# = O_U$ se $O^\# = O$, a condição de η -pseudo-Hermiticidade para U . Logo, $O^\# = O \iff O_U^\# = O_U$. $\square$

Proposição 4. *Seja $\mathcal{H}$ um espaço de produto interno, η_1 e η_2 automorfismos lineares Hermiteanos e $O : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ um operador linear. Então, o adjunto η_1 -pseudo-Hermiteano de O é igual ao seu adjunto η_2 -pseudo-Hermiteano se, e somente se, $\eta_2^{-1}\eta_1$ comuta com O .*

Prova: Notemos que a conjugação pseudo-Hermiteana, como definida, nos dá $O_{\eta_1}^\# = \eta_1^{-1}O^\dagger\eta_1$ e $O_{\eta_2}^\# = \eta_2^{-1}O^\dagger\eta_2$ como os adjuntos η_1 -pseudo-Hermiteano e η_2 -pseudo-Hermiteano de O , respectivamente. Em seguida, verifiquemos a condição proposta:

$$O_{\eta_1}^\# = O_{\eta_2}^\# \rightarrow \eta_1^{-1}O^\dagger\eta_1 = \eta_2^{-1}O^\dagger\eta_2, \quad (3.33)$$

onde, atuando com η_1 pela esquerda e η_2^{-1} pela direita em ambos os lados, temos

$$O^\dagger\eta_1\eta_2^{-1} = \eta_1\eta_2^{-1}O^\dagger. \quad (3.34)$$

Fazendo a conjugação Hermiteana da expressão acima, considerando a Hermiticidade de η_i e η_i^{-1} , temos:

$$\eta_2^{-1}\eta_1 O = O \eta_2^{-1}\eta_1 \quad (3.35)$$

e assim, sabendo que o comutador tem a forma $[\eta_2^{-1}\eta_1, O] = \eta_2^{-1}\eta_1 O - O \eta_2^{-1}\eta_1$:

$$O_{\eta_1}^\# = O_{\eta_2}^\# \iff [\eta_2^{-1}\eta_1, O] = 0. \quad \square \quad (3.36)$$

Corolário 2. *Se a Hamiltoniana H de um sistema quântico é pseudo-Hermiteana em relação à dois automorfismos lineares Hermiteanos diferentes η_1 e η_2 do espaço de Hilbert, então $\eta_2^{-1}\eta_1$ é uma simetria do sistema. Por outro lado, seja η um automorfismo linear Hermiteano do espaço de Hilbert e G um grupo de simetria do sistema cujos elementos g são representados por operadores lineares invertíveis. Então ηU_g é um automorfismo linear Hermiteano e H é ηU_g -pseudo-Hermiteano desde que $U_g^\dagger \eta U_g = \eta$.*

Prova: Visto que a Hamiltoniana H é pseudo-Hermiteana em relação à η_1 e η_2 simultaneamente:

$$H = H_{\eta_1}^\#, \quad H = H_{\eta_2}^\#, \implies H_{\eta_1}^\# = H_{\eta_2}^\#, \quad (3.37)$$

logo, por consequência da Proposição 4, $[\eta_2^{-1}\eta_1, H] = 0$. A própria definição de simetria diz que qualquer operador A que comute com a Hamiltoniana é uma simetria do sistema, logo $\eta_2^{-1}\eta_1$ se encaixa na definição.

Considere agora um sistema com a Hamiltoniana H e um operador linear invertível U_g que representa um elemento g do grupo de simetria G . Mais uma vez pela definição da simetria de um sistema temos que $[U_g, H] = 0 \rightarrow U_g H = H U_g$, ou ainda, $U_g^{-1} H = H U_g^{-1}$. Note que, se o operador representa uma simetria e é linear, via Teorema de Wigner, ele é obrigatoriamente unitário, de modo que $U_g^\dagger = U_g^{-1}$ e a relação enunciada no corolário pode ser rearranjada como

$U_g^{-1} = \eta U_g^{-1} \eta^{-1}$. Assim a relação de simetria pode ser dada como

$$\eta^{-1} U_g \eta H = H \eta^{-1} U_g \eta, \quad (3.38)$$

onde, pela mesma relação, podemos reescrever $U_g \eta = \eta U_g$, de modo a seguir a notação enunciada. Assim temos a seguinte relação

$$\eta^{-1}(\eta U_g) H = H \eta^{-1}(\eta U_g) \implies [\eta^{-1}(\eta U_g), H] = 0 \quad (3.39)$$

e seguindo a Proposição 4, $\eta^{-1}(\eta U_g)$ será uma simetria do sistema e a Hamiltoniana será tanto η -pseudo-Hermiteana quanto ηU_g -pseudo-Hermiteana. $\square$

Com estas propriedades da operação de conjugação pseudo-Hermiteana, podemos investigar a relação da pseudo-Hermiticidade com o produto interno definido em um dado espaço de Hilbert.

3.4 NOVO PRODUTO INTERNO

Como foi anteriormente demonstrado, a Hermiticidade é uma propriedade definida em termos do produto de um dado espaço, de modo que na Mecânica Quântica usual é sempre feita uma certa escolha de produto interno de primeiros princípios, e assim as noções de conjugação Hermiteana e Hermiticidade de um operador são bem definidas. Porém, tal qual argumentado e exemplificado em (MOSTAFAZADEH, 2010), é possível manter um certo grau de liberdade na formulação da teoria em relação à escolha de tal produto e ainda manter a descrição de uma mesma teoria.

Primeiramente, falemos sobre o *porquê* desta possibilidade; considere um par de espaços de Hilbert separáveis⁵ $\mathcal{H}_1$ e $\mathcal{H}_2$ que são idênticos, a menos de seus produtos internos, aqui denotados como $\langle \cdot | \cdot \rangle_1$ e $\langle \cdot | \cdot \rangle_2$, respectivamente. Estes dois espaços serão ditos unitariamente equivalentes se existe um operador linear definido em todo espaço $U : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ tal que, para todo $\psi_1, \phi_1 \in \mathcal{H}_1$ temos:

$$\langle U \psi_1 | U \phi_1 \rangle_2 = \langle \psi_1 | \phi_1 \rangle_1. \quad (3.40)$$

Desta forma, podemos definir um operador η , o *operador pseudo-métrica*, de modo que a equivalência entre o espaço de Hilbert usual e aquele com um novo produto pode ser atingida. Definamos aqui então, para um espectro discreto por simplicidade, tal operador como:

$$\eta = \sum_{n=1}^N e_n |\xi_n\rangle \langle \xi_n|, \quad (3.41)$$

sendo $\{|\xi_n\rangle\}$ um conjunto completo que forma uma base ortonormal do espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ e e_n os auto-valores da pseudo-métrica nesta base. Definamos o novo produto interno.

⁵ Um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ é dito separável se contém um subconjunto $\mathcal{S}$ denso contável; um subconjunto denso por sua vez é aquele em que todo elemento de $\mathcal{H}$ pode ser obtido como um limite de uma sequência de elementos de $\mathcal{S}$ (MOSTAFAZADEH, 2010).

Definição 3. *Seja $\mathcal{H}$ um espaço de Hilbert com o produto usual $\langle \cdot | \cdot \rangle$. Uma função $\langle\langle \cdot | \cdot \rangle\rangle_\eta : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ que satisfaça as seguintes condições:*

1. *Dado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, se $\langle\langle \phi | \psi \rangle\rangle_\eta = 0$ para todo $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$, isto implica $|\psi\rangle = |0\rangle$, (produto não-degenerado);*
2. *Para cada par de elementos $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ de $\mathcal{H}$, $\langle\langle \psi | \phi \rangle\rangle_\eta = \langle\langle \phi | \psi \rangle\rangle_\eta^*$ (produto Hermiteano);*
3. *Para todo elemento $|\psi\rangle, |\phi\rangle, |\chi\rangle$ de $\mathcal{H}$, e todo $a, b, c \in \mathbb{C}$, $\langle\langle a\psi | b\phi + c\chi \rangle\rangle_\eta = a^*b\langle\langle \psi | \phi \rangle\rangle_\eta + a^*c\langle\langle \psi | \chi \rangle\rangle_\eta$ (produto sesquilinear);*

será chamada produto interno pseudo-Hermiteano e pode ser definida com o operador pseudo-métrica $\eta : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ de acordo com:

$$\langle\langle \cdot | \cdot \rangle\rangle_\eta := \langle \cdot | \eta | \cdot \rangle. \quad (3.42)$$

É visível que todo produto interno em $\mathcal{H}$ é um pseudo-produto interno sob esta definição mediante uma pseudo-métrica bem definida; porém a inversa não é verdadeira. Seguimos com a seguinte proposição.

Proposição 5. *Seja um operador $O : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ e um operador pseudo-métrica $\eta : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Se O for η -pseudo-Hermiteano, ou seja, $O = \eta^{-1}O^\dagger\eta$, então:*

$$\langle\langle \psi_1 | O\psi_2 \rangle\rangle_\eta = \langle\langle O\psi_1 | \psi_2 \rangle\rangle_\eta, \quad (3.43)$$

ou seja, todo operador η -pseudo-Hermiteano é Hermiteano em relação ao produto interno pseudo Hermiteano $\langle\langle \cdot | \cdot \rangle\rangle_\eta$.

Prova: Pela definição

$$\langle\langle \psi_1 | O\psi_2 \rangle\rangle_\eta = \langle \psi_1 | \eta O | \psi_2 \rangle, \quad (3.44)$$

onde podemos empregar a relação de η -pseudo-Hermiticidade na forma $\eta O = O^\dagger\eta$ e assim

$$\langle\langle \psi_1 | O\psi_2 \rangle\rangle_\eta = \langle \psi_1 | O^\dagger\eta | \psi_2 \rangle = \langle\langle O\psi_1 | \psi_2 \rangle\rangle_\eta. \quad \square \quad (3.45)$$

Com as considerações sobre a conjugação pseudo-Hermiteana e o conceito de η -pseudo-Hermiticidade, podemos aplicar tais definições à sistemas quânticos com tais características, continuando com os estudos sobre (MOSTAFAZADEH, 2002a). Consideremos um sistema quântico com uma Hamiltoniana $H = H(t)$ possivelmente não-Hermiteana e com dependência temporal, e um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ dotado da pseudo-métrica η .

Proposição 6. *O produto interno pseudo-Hermiteano $\langle\langle \cdot | \cdot \rangle\rangle_\eta$ é invariante sob evolução temporal gerada pela Hamiltoniana H se, e somente se, H é η -pseudo-Hermiteana.*

Prova: Primeiro notemos que a condição de η -pseudo-Hermiticidade de H é equivalente a

$$H^\dagger \eta = \eta H. \quad (3.46)$$

Agora, consideremos a equação de Schrödinger em unidades naturais

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle. \quad (3.47)$$

Podemos atuar com o automorfismo linear Hermiteano η pela esquerda

$$i \frac{d}{dt} \eta |\psi(t)\rangle = \eta H |\psi(t)\rangle \quad (3.48)$$

e então tomar o adjunto Hermiteano da expressão. Sabendo que η é um automorfismo Hermiteano, temos tanto que $(\eta |\psi(t)\rangle)^\dagger = \langle \psi(t) | \eta^\dagger = \langle \psi(t) | \eta$, quanto $(\eta H |\psi(t)\rangle)^\dagger = \langle \psi(t) | H^\dagger \eta^\dagger = \langle \psi(t) | H^\dagger \eta$. Assim

$$i \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \eta = - \langle \psi(t) | H^\dagger \eta. \quad (3.49)$$

Agora, podemos considerar a evolução temporal do produto interno pseudo-Hermiteano, tal como visto para o produto usual em (COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOE, 1977), considerando $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ autovetores da mesma Hamiltoniana

$$\frac{d}{dt} \langle\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle\rangle_\eta = \left(\frac{d}{dt} \langle \psi_1 | \eta \right) |\psi_2\rangle + \langle \psi_1 | \eta \left(\frac{d}{dt} |\psi_2\rangle \right). \quad (3.50)$$

Podemos identificar no primeiro termo o lado esquerdo de (3.49), e no segundo termo identificamos o lado esquerdo de (3.47), ambos a menos de uma constante multiplicativa. Fazendo as substituições apropriadas, teremos

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle\rangle_\eta = \langle \psi_1 | (\eta H - H^\dagger \eta) | \psi_2 \rangle. \quad (3.51)$$

Notamos então que o novo produto interno é constante sob translação temporal, ou seja, a expressão acima é nula se, e somente se, (3.46) é respeitada. $\square$

Observe que para a evolução temporal do produto usual temos a seguinte condição

$$i \frac{d}{dt} \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | (H^\dagger - H) | \psi_2 \rangle, \quad (3.52)$$

o que se mostra um caso especial de (3.51). Como dito anteriormente, todo produto interno em $\mathcal{H}$ é um produto pseudo-Hermiteano; o produto interno usual tem $\eta = \mathbb{I}$. A condição usual de Hermiticidade $H^\dagger = H$ também é um caso particular da condição de η -pseudo-Hermiticidade para a mesma condição da pseudo-métrica. Isto pode ser intuído visto que a identidade $\mathbb{I}$ é um automorfismo linear e Hermiteano do espaço de Hilbert com produto interno usual, tal qual requerido na Definição 1.

A condição usual de Hermiticidade não é suficiente para garantir a invariância do novo produto interno para uma pseudo-métrica η qualquer; similarmente, o produto interno usual não será invariante para uma Hamiltoniana η -pseudo-Hermiteana para uma pseudo-métrica η qualquer. Logo, precisamos da definição do produto interno pseudo-Hermiteano $\langle\langle\psi_1|\psi_2\rangle\rangle_\eta$ para lidar com uma transformação de simetria gerada por uma Hamiltoniana possivelmente não-Hermiteana.

Exploremos agora a relação de autovalor para Hamiltoniana η -pseudo-Hermiteana, que nos dará como autovalor a energia de um determinado estado quântico

$$H |\psi_i\rangle = E_i |\psi_i\rangle. \quad (3.53)$$

De modo análogo ao desenvolvido anteriormente, podemos atuar com a pseudo-métrica η pela esquerda, lembrando que tal operador é linear

$$\eta H |\psi_i\rangle = E_i \eta |\psi_i\rangle \quad (3.54)$$

e tomar o adjunto Hermiteano da expressão, considerando E_i possivelmente complexo

$$\langle\psi_i| H^\dagger \eta = E_i^* \langle\psi_i| \eta. \quad (3.55)$$

Considere então dois estados $|\psi_i\rangle$ e $|\psi_j\rangle$, com seus respectivos autovalores E_i e E_j . Atuando com $\langle\psi_j|$ pela esquerda em (3.54) e $|\psi_j\rangle$ pela direita em (3.55), podemos escrever as seguintes relações:

$$\langle\psi_j| \eta H |\psi_i\rangle = E_i \langle\psi_j| \eta |\psi_i\rangle, \quad (3.56)$$

$$\langle\psi_j| H^\dagger \eta |\psi_i\rangle = E_j^* \langle\psi_j| \eta |\psi_i\rangle, \quad (3.57)$$

realizando oportunas mudanças de índices. Subtraindo (3.56) de (3.57), temos

$$\langle\psi_j| (H^\dagger \eta - \eta H) |\psi_i\rangle = (E_j^* - E_i) \langle\psi_j| \eta |\psi_i\rangle. \quad (3.58)$$

Como partimos da proposta de uma Hamiltoniana η -pseudo-Hermiteana, a condição (3.46) é satisfeita, fazendo com que o lado esquerdo da relação acima seja nulo. Temos então:

$$(E_j^* - E_i) \langle\langle\psi_j|\psi_i\rangle\rangle_\eta = 0. \quad (3.59)$$

Como implicação direta desta relação, temos a seguinte proposição.

Proposição 7. *Uma Hamiltoniana η -pseudo-Hermiteana tem as seguintes propriedades:*

(a) *Os autoestados com autovalor não-real tem sua η -semi-norma nula:*

$$E_i \notin \mathbb{R} \implies \| |\psi_i\rangle \|_\eta^2 := \langle\langle\psi_i|\psi_i\rangle\rangle_\eta = 0; \quad (3.60)$$

(b) *Quaisquer dois autoestados com autovalores reais distintos ou autovalores conjugados complexos distintos são η -ortogonais:*

$$E_i \neq E_j \in \mathbb{R} \implies \langle\langle \psi_i | \psi_j \rangle\rangle_\eta = 0, \quad (3.61)$$

$$E_i \neq E_j^* \notin \mathbb{R} \implies \langle\langle \psi_i | \psi_j \rangle\rangle_\eta = 0. \quad (3.62)$$

Prova: Para a primeira parte da proposição, notemos que (3.59) para um mesmo autoestado nos dá:

$$(E_i^* - E_i) \langle\langle \psi_i | \psi_i \rangle\rangle_\eta = 0. \quad (3.63)$$

Como partimos da premissa de que o estado $|\psi_i\rangle$ tem autovalor complexo, a diferença $(E_i^* - E_i)$ é sempre um número complexo não-nulo. Deste modo, a equação acima só será verdadeira se $\langle\langle \psi_i | \psi_i \rangle\rangle_\eta = 0$. Para a segunda parte da proposição, podemos observar diretamente a relação (3.59) para conclusão da prova. $\square$

Analiseemos mais a fundo a primeira parte da proposição; podemos abrir o produto pseudo-Hermiteano utilizando a forma da pseudo-métrica dada por (3.41)

$$\langle\langle \psi_i | \psi_i \rangle\rangle_\eta = \langle \psi_i | \sum_{n=1}^N e_n |\xi_n\rangle \langle \xi_n | \psi_i \rangle, \quad (3.64)$$

onde podemos utilizar de propriedades do produto interno usual para reescrever a expressão como

$$\langle\langle \psi_i | \psi_i \rangle\rangle_\eta = \sum_{n=1}^N e_n \langle \psi_i | \xi_n \rangle \langle \xi_n | \psi_i \rangle. \quad (3.65)$$

Considerando que $|\psi_i\rangle$ pode ser expandido na base ortonormal sob a forma

$$|\psi_i\rangle = \sum_{m=1}^N c_{im} |\xi_m\rangle \rightarrow \langle \xi_n | \psi_i \rangle = c_{in}, \quad (3.66)$$

reduzimos a expressão da η -semi-norma para

$$\langle\langle \psi_i | \psi_i \rangle\rangle_\eta = \sum_{n=1}^N e_n |c_{in}|^2, \quad (3.67)$$

onde podemos voltar à expressão advinda de (3.59)

$$\sum_{n=1}^N (E_i^* - E_i) e_n |c_{in}|^2 = 0. \quad (3.68)$$

Daqui, reconhecemos duas possibilidades para que a expressão seja nula: a primeira, $E_i^* = E_i$, é inválida por hipótese visto que $E_i \notin \mathbb{R}$; outra possibilidade seria o ajuste dos autovalores e_n da

pseudo-métrica e dos coeficientes da expansão c_{in} de modo a resultar em uma soma nula, o que nos dá uma pletora de possibilidades. Com esta indeterminação, intui-se a necessidade de um refinamento na representação dos autoestados de uma Hamiltoniana pseudo-Hermiteana com autovalores não-reais, que ainda respeite a segunda parte da proposição. Seguimos então com a definição de um sistema biortonormal, de acordo com (MOSTAFAZADEH, 2010).

3.5 SISTEMAS BIORTONORMAIS E AUTOVALORES COMPLEXOS

Consideremos um conjunto $\{|\psi_n\rangle\}$ que seja uma base de um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, e um conjunto $\{|\xi_n\rangle\}$ que é uma base *ortonormal* do mesmo espaço, obtida através da aplicação do processo de Gram-Schmidt no primeiro conjunto. Como ambos conjuntos são base, os vetores de cada um dos conjuntos pode ser escrito em termos do outro:

$$|\xi_n\rangle = \sum_{m=1}^N B_{mn} |\psi_m\rangle, \quad (3.69)$$

onde B_{mn} é um número complexo com $n = 1, 2, \dots, N$ e

$$|\psi_m\rangle = \sum_{k=1}^N \langle \xi_k | \psi_m \rangle |\xi_k\rangle, \quad (3.70)$$

utilizando relação (3.3). Substituindo (3.70) em (3.69), obtemos a relação

$$|\xi_n\rangle = \sum_{k=1}^N \sum_{m=1}^N B_{mn} \langle \xi_k | \psi_m \rangle |\xi_k\rangle, \quad (3.71)$$

de onde podemos ver, pela ortonormalidade do conjunto $\{|\xi_n\rangle\}$, que

$$\sum_{m=1}^N B_{mn} \langle \xi_k | \psi_m \rangle = \delta_{nk} \quad \forall n, k = 1, 2, \dots, N. \quad (3.72)$$

Assim, a matriz $N \times N$ que contém os coeficientes B_{mn} de (3.69) deve ser invertível, de modo que $\langle \xi_m | \psi_n \rangle = B_{mn}^{-1}$. Substituindo essa relação em (3.70), ficamos com

$$|\psi_m\rangle = \sum_{k=1}^N B_{km}^{-1} |\xi_k\rangle. \quad (3.73)$$

Agora, definamos um certo conjunto $\{|\phi_n\rangle\}$ cuja expansão em termos do conjunto $\{|\xi_n\rangle\}$ é dada por

$$|\phi_n\rangle := \sum_{j=1}^N B_{nj}^* |\xi_j\rangle, \quad (3.74)$$

com os coeficientes B_{nj}^* definidos como os conjugados complexos dos coeficientes da expansão de

$|\xi_n\rangle$ em (3.69). Com isto, podemos analisar o seguinte produto interno usual

$$\langle \phi_n | \psi_m \rangle = \sum_{j=1}^N B_{nj} \langle \xi_j | \psi_m \rangle, \quad (3.75)$$

o que, por si só, de acordo com (3.72), fornece uma ortonormalidade entre os conjuntos $\{|\psi_n\rangle\}$ e $\{|\phi_n\rangle\}$. Essa relação de ortonormalidade pode ser explicitada da seguinte maneira: de (3.70) temos

$$\langle \phi_n | \psi_m \rangle = \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N B_{nj} B_{km}^{-1} \langle \xi_j | \xi_k \rangle, \quad (3.76)$$

onde, dada a ortonormalidade da base $|\xi_n\rangle$, $\langle \xi_j | \xi_k \rangle = \delta_{jk}$. Efetuando a soma em k , temos

$$\langle \phi_n | \psi_m \rangle = \sum_{j=1}^N B_{nj} B_{jm}^{-1}. \quad (3.77)$$

Visto que a matriz é quadrada, temos então a relação:

$$\langle \phi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm} \quad \forall \quad n, m = 1, 2, \dots, N. \quad (3.78)$$

Consideremos agora um vetor $|\psi\rangle$ qualquer do espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, com sua expansão em termos da base ortogonal $\{|\xi_n\rangle\}$ dada tal qual (3.2):

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^N c_k |\xi_k\rangle, \quad (3.79)$$

onde, de (3.69),

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^N \sum_{n=1}^N c_k B_{nk} |\psi_n\rangle. \quad (3.80)$$

Note que, utilizando de (3.74) e da ortonormalidade da base $\{|\xi_n\rangle\}$, temos a seguinte relação para o coeficiente B_{nk}

$$\langle \xi_k | \phi_n \rangle = \sum_{j=1}^N B_{nj}^* \langle \xi_k | \xi_j \rangle \implies B_{nk} = \langle \phi_n | \xi_k \rangle. \quad (3.81)$$

Aplicando (3.81) em (3.80), temos

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^N \sum_{n=1}^N c_k \langle \phi_n | \xi_k \rangle |\psi_n\rangle, \quad (3.82)$$

onde tanto c_k quanto $\langle \phi_n | \xi_k \rangle$ são números complexos, de modo que podemos rearranjar a

expressão também levando em conta a sesquilinearidade do produto

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N |\psi_n\rangle \langle \phi_n| \sum_{k=1}^N c_k |\xi_k\rangle. \quad (3.83)$$

Aqui, reconhecemos uma vez mais a expressão para $|\psi\rangle$, nosso ponto de partida. Assim temos a relação

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N |\psi_n\rangle \langle \phi_n|\psi\rangle. \quad (3.84)$$

Similarmente à relação de completeza em (3.7), aqui obtivemos uma relação envolvendo os vetores dos conjuntos $\{|\psi_n\rangle\}$ e $\{|\phi_n\rangle\}$, assim como pode ser obtido para uma base ortonormal do espaço

$$\sum_{n=1}^N |\psi_n\rangle \langle \phi_n| = \mathbb{I} \quad (3.85)$$

e a relação se mantém também na forma $\sum_{n=1}^N |\phi_n\rangle \langle \psi_n| = \mathbb{I}$. Uma sequência formada pelos pares ordenados $\{(|\psi_n\rangle, |\phi_n\rangle)\}$ de elementos do espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ que satisfaça a condição (3.78) é chamada de *sistema biortonormal*; um sistema biortonormal que também satisfaça (3.85) é chamado *completo* (MOSTAFAZADEH, 2010).

Como é possível demonstrar que, sendo $\{|\psi_n\rangle\}$ uma base de $\mathcal{H}$, o conjunto $\{|\phi_n\rangle\}$ também o é, a sequência mencionada pode ser referida como uma base biortogonal do espaço de Hilbert $\mathcal{H}$. Deste modo, podemos definir uma Hamiltoniana η -pseudo-Hermiteana com as seguintes relação de autovalor:

$$H |\psi_n, a\rangle = E_n |\psi_n, a\rangle, \quad H^\dagger |\phi_n, \alpha\rangle = E_n^* |\phi_n, \alpha\rangle, \quad (3.86)$$

com os índices a e α rotulando possíveis degenerescências dos autovalores. As relações (3.78) e (3.85) podem ser reescritas levando em conta um índice de degenerescência da seguinte forma:

$$\langle \phi_n, a | \psi_m, b \rangle = \delta_{nm} \delta_{ab}, \quad (3.87)$$

$$\sum_{n=1}^N \sum_{a=1}^{d_n} |\psi_n, a\rangle \langle \phi_n, a| = \mathbb{I}, \quad (3.88)$$

onde d_n é o grau de degenerescência. Com estas definições, verifiquemos a seguinte proposição:

Proposição 8. *Seja H uma Hamiltoniana pseudo-Hermiteana com as relações de autovalor descritas acima. Então, os autovalores complexos de H vêm em pares complexo conjugados com a mesma multiplicidade.*

Prova: Observemos as relações (3.86), aplicando (3.46)

$$H^\dagger |\phi_n, \alpha\rangle = E_n^* |\phi_n, \alpha\rangle \rightarrow \eta H \eta^{-1} |\phi_n, \alpha\rangle = E_n^* |\phi_n, \alpha\rangle \quad (3.89)$$

e atuando com η^{-1} pela esquerda, resultando em

$$H(\eta^{-1} |\phi_n, \alpha\rangle) = E_n^*(\eta^{-1} |\phi_n, \alpha\rangle), \quad (3.90)$$

onde podemos reconhecer uma relação de autovalor para a Hamiltoniana com o par característico dado pelo autovetor não-nulo $\eta^{-1} |\phi_n, \alpha\rangle$ e autovalor E_n^* . Aqui reconhecemos que o conjugado complexo do autovalor de um vetor $|\psi_n, \alpha\rangle$ também é autovalor da Hamiltoniana, mas com autovetor $\eta^{-1} |\phi_n, \alpha\rangle$; é justo intuir então que o operador η^{-1} faz um mapeamento entre vetores do subespaço dos autovetores de E_n e vetores do subespaço de autovetores de E_n^* .

Por sua vez, a pseudo-métrica é um automorfismo, como definido anteriormente, de modo que este mapeamento é bijetor e manterá tanto a multiplicidade geométrica quanto a algébrica do subespaço dos autovetores, ou seja, o grau de degenerescência para cada autovalor não será alterado e a dimensão do subespaço é mantida. $\square$

Pela proposição, vemos então que um autoestado $|\psi_n\rangle$ de autovalor complexo $E_{\tilde{n}}$ terá seu autovalor descrito como um par de números complexos E_{n_+} , com sua parte imaginária positiva, e $E_{n_-} = E_{n_+}^*$, com sua parte imaginária negativa, de modo que sua composição será um número real.

Observando (3.85), também podemos expressar uma forma mais explícita da relação de completeza levando em conta subconjuntos que descrevam autovalores reais, aqui denotados pelos índices ' n_0 ' e não-reais, denotados pelos índices ' n_+ ' para a parte imaginária positiva e ' n_- ' para a parte imaginária negativa:

$$\sum_{n_0} \sum_{a=1}^{d_{n_0}} |\psi_{n_0}, a\rangle \langle \phi_{n_0}, a| + \sum_{n_+} \sum_{\alpha=1}^{d_{n_+}} (|\psi_{n_+}, \alpha\rangle \langle \phi_{n_+}, \alpha| + |\psi_{n_-}, \alpha\rangle \langle \phi_{n_-}, \alpha|) = \mathbb{I}. \quad (3.91)$$

Note que os estados com autovalores complexos, acima referidos com o índice $\tilde{n}$, estão divididos em índices n_+ e n_- , mas estes representam de fato um mesmo estado e sempre ocorrem simultaneamente; logo, é lícito considerar uma soma apenas n_+ .

Podemos então expandir os autoestados da Hamiltoniana, atuando na expressão acima com o operador Hamiltoniano pela esquerda e obtendo os autovalores correspondentes para cada autoestado:

$$H = \sum_{n_0} \sum_{a=1}^{d_{n_0}} E_{n_0} |\psi_{n_0}, a\rangle \langle \phi_{n_0}, a| + \sum_{n_+} \sum_{\alpha=1}^{d_{n_+}} (E_{n_+} |\psi_{n_+}, \alpha\rangle \langle \phi_{n_+}, \alpha| + E_{n_+}^* |\psi_{n_-}, \alpha\rangle \langle \phi_{n_-}, \alpha|), \quad (3.92)$$

novamente considerando possíveis degenerescências dos autovalores. Nesta expressão, podemos notar que o primeiro termo refere-se à seção usual dos autoestados da Hamiltoniana com

autovalores reais, enquanto o segundo termo corresponde aos autoestados com autovalores complexos, algo que introduzimos aqui para lidar com o espectro de uma Hamiltoniana não-Hermiteana.

Note que pela prova da Proposição 8, o operador η^{-1} faz a conexão entre os autoestados $|\psi_n, a\rangle$ correspondentes aos autovalores E_n e os autoestados $|\phi_n, \alpha\rangle$ correspondente aos autovalores E_n^* ; tal definição pode também ser levada em conta para autovalores reais, simplesmente considerando $E_n^* = E_n$. Assim, valendo-nos da notação utilizada em (3.91), podemos considerar que tal mapeamento tem a seguinte forma⁶:

$$E_n \in \mathbb{R} \implies |\psi_{n_0}, a\rangle = \eta^{-1} |\phi_{n_0}, a\rangle; \quad E_n \in \mathbb{C} \implies |\psi_{n_{\mp}}, a\rangle = \eta^{-1} |\phi_{n_{\pm}}, a\rangle, \quad (3.93)$$

de modo que podemos substituir tais expressões para $|\psi_{n_0}, a\rangle$ e $|\psi_{n_{\mp}}, a\rangle$ em (3.91), assim chegando a uma nova expressão para η e η^{-1} em termos da base biortonormal:

$$\eta = \sum_{n_0} \sum_{a=1}^{d_{n_0}} |\phi_{n_0}, a\rangle \langle \phi_{n_0}, a| + \sum_{n_+} \sum_{\alpha=1}^{d_{n_+}} (|\phi_{n_+}, \alpha\rangle \langle \phi_{n_-}, \alpha| + |\phi_{n_-}, \alpha\rangle \langle \phi_{n_+}, \alpha|), \quad (3.94)$$

$$\eta^{-1} = \sum_{n_0} \sum_{a=1}^{d_{n_0}} |\psi_{n_0}, a\rangle \langle \psi_{n_0}, a| + \sum_{n_+} \sum_{\alpha=1}^{d_{n_+}} (|\psi_{n_-}, \alpha\rangle \langle \psi_{n_+}, \alpha| + |\psi_{n_+}, \alpha\rangle \langle \psi_{n_-}, \alpha|). \quad (3.95)$$

Note que, também de (3.93), podemos chegar à η -ortonormalização dos vetores $|\psi_{n_0}, a\rangle$ e $|\psi_{n_{\pm}}, a\rangle$, lembrando que o sistema biortonormal satisfaz a condição (3.87)

$$\langle\langle \psi_{n_0}, a | \psi_{m_0}, b \rangle\rangle_{\eta} = \delta_{n_0, m_0} \delta_{ab}, \quad \langle\langle \psi_{n_{\pm}}, \alpha | \psi_{m_{\mp}}, \beta \rangle\rangle_{\eta} = \delta_{n_{\pm}, m_{\mp}} \delta_{\alpha\beta}, \quad (3.96)$$

o que faz com que esta representação respeite a Proposição 7, (b). Também é válido ressaltar que os autoestados que possuem autovalores reais são ortogonais àqueles que possuem autovalores complexos; aplicar um autoestado $|\psi_{m_0}, a\rangle$ pela direita em (3.92), pela relação (3.87), resultará em apenas estados com autovalor real, e o mesmo para a aplicação de um autoestado $|\psi_{m_{\pm}}, a\rangle$. Assim, podemos enunciar o seguinte teorema com relação aos autovalores de uma Hamiltoniana não-Hermiteana.

Teorema 3. *Seja H uma Hamiltoniana não-Hermiteana com espectro discreto e um sistema completo biortonormal de autovetores de base $\{|\psi_n, a\rangle, |\phi_n, a\rangle\}$. Então H é pseudo-Hermiteana se, e somente se, uma das seguintes condições é satisfeita:*

1. *O espectro de H é real;*
2. *Os autovalores complexos vêm em pares complexo conjugado e a multiplicidade dos autovalores complexo conjugados é a mesma.*

Prova: A Proposição 8 nos diz que a pseudo-Hermiticidade é condição suficiente para segundo item do Teorema. O primeiro item por sua vez é condição necessária para a pseudo-Hermiticidade,

⁶ Consideramos que possíveis coeficientes relacionando $|\phi_n, a\rangle$ e $|\psi_n, a\rangle$ foram reduzidos a uma matriz identidade (MOSTAFAZADEH, 2002a), (MOSTAFAZADEH, 2002b).

suposto pela exigência física de valores reais para um espectro de um observável. Assim, a pseudo-Hermiticidade é condição suficiente para ambos os itens enunciados; provemos agora que os itens 1 e 2 são também condição suficiente para a pseudo-Hermiticidade, estabelecendo uma relação “suficiente e necessária” entre a pseudo-Hermiticidade e as premissas sobre o espectro.

Uma Hamiltoniana com as características descritas no enunciado do teorema nos leva à representação de acordo com (3.92). Se uma das condições acima for satisfeita, é possível garantir o mapeamento tal qual (3.93) e construir a pseudo-métrica η em (3.94), e sua inversa η^{-1} em (3.95). Com isso, podemos verificar se (3.46) é satisfeita:

$$\begin{aligned} \eta^{-1}H^\dagger\eta &= \sum_{m_0,n_0,k_0} \sum_{b,a,c} E_{n_0} |\psi_{m_0}, b\rangle \langle \psi_{m_0}, b| \phi_{n_0}, a\rangle \langle \psi_{n_0}, a| \phi_{k_0}, c\rangle \langle \phi_{k_0}, c| + \\ &+ \sum_{m_+,n_+,k_+} \sum_{\beta,\alpha,\gamma} E_{n_+}^* |\psi_{m_-}, \beta\rangle \langle \psi_{m_+}, \beta| \phi_{n_+}, \alpha\rangle \langle \psi_{n_+}, \alpha| \phi_{k_+}, \gamma\rangle \langle \phi_{k_-}, \gamma| + \\ &+ \sum_{m_+,n_+,k_+} \sum_{\beta,\alpha,\gamma} E_{n_+} |\psi_{m_+}, \beta\rangle \langle \psi_{m_-}, \beta| \phi_{n_-}, \alpha\rangle \langle \psi_{n_-}, \alpha| \phi_{k_-}, \gamma\rangle \langle \phi_{k_+}, \gamma|, \end{aligned} \quad (3.97)$$

onde utilizamos de (3.87) para reduzir os produtos internos usuais que temos dentro das somas

$$\begin{aligned} \eta^{-1}H^\dagger\eta &= \sum_{m_0,n_0,k_0} \sum_{b,a,c} E_{n_0} |\psi_{m_0}, b\rangle \delta_{m_0,n_0} \delta_{b,a} \delta_{n_0,k_0} \delta_{a,c} \langle \phi_{k_0}, c| + \\ &+ \sum_{m_+,n_+,k_+} \sum_{\beta,\alpha,\gamma} E_{n_+}^* |\psi_{m_-}, \beta\rangle \delta_{m_+,n_+} \delta_{\beta,\alpha} \delta_{n_+,k_+} \delta_{\alpha,\gamma} \langle \phi_{k_-}, \gamma| + \\ &+ \sum_{m_+,n_+,k_+} \sum_{\beta,\alpha,\gamma} E_{n_+} |\psi_{m_+}, \beta\rangle \delta_{m_-,n_-} \delta_{\beta,\alpha} \delta_{n_-,k_-} \delta_{\alpha,\gamma} \langle \phi_{k_+}, \gamma| \end{aligned} \quad (3.98)$$

e assim, efetuando todas as somas em $m_0, k_0, b, c, m_+, k_+, \beta, \gamma$, temos finalmente

$$\begin{aligned} \eta^{-1}H^\dagger\eta &= \sum_{n_0} \sum_a E_{n_0} |\psi_{n_0}, a\rangle \langle \phi_{n_0}, a| + \\ &+ \sum_{n_+} \sum_\alpha (E_{n_+} |\psi_{n_+}, \alpha\rangle \langle \phi_{n_+}, \alpha| + E_{n_+}^* |\psi_{n_-}, \alpha\rangle \langle \phi_{n_-}, \alpha|), \end{aligned} \quad (3.99)$$

o que coincide com a expressão para a Hamiltoniana (3.92); logo, a condição de η -pseudo-Hermiticidade é satisfeita, assim provando o Teorema. $\square$

Como finalização desta seção, trazemos duas implicações diretas do Teorema acima provadas sob a forma de corolários:

Corolário 1. *Toda Hamiltoniana não-Hermiteana com um espectro discreto real e um sistema completo biortonormal de autovetores de base é pseudo-Hermiteana.*

Prova: Aqui temos o caso em que a primeira condição descrita no Teorema é satisfeita e, como provado, a representação de uma Hamiltoniana via (3.92) leva a pseudo-Hermiticidade. $\square$

Corolário 2. *Toda Hamiltoniana PT-simétrica com um espectro discreto e um sistema completo biortonormal de autovetores de base é pseudo-Hermiteana.*

Prova: Considerando a relação de autovalor para a Hamiltoniana na forma $H |E_i\rangle = E_i |E_i\rangle$ e definindo este mesmo autoestado transformado pela simetria do sistema como $|E'_i\rangle := PT |E_i\rangle$. Então, considere a Hamiltoniana atuando em tal estado transformado:

$$H |E'_i\rangle = H(PT |E_i\rangle), \quad (3.100)$$

onde, visto que PT é uma simetria do sistema, temos que $[PT, H] = 0$. Assim:

$$H |E'_i\rangle = PT(H |E_i\rangle). \quad (3.101)$$

Aqui, reconhecemos a relação de autovalor para o estado não transformado, e assim, utilizando da linearidade do operador de paridade e a antilinearidade do operador de inversão temporal, temos:

$$H |E'_i\rangle = PT(E_i |E_i\rangle) \rightarrow H |E'_i\rangle = E_i^* |E'_i\rangle, \quad (3.102)$$

o que nos leva à mesma conclusão da Proposição 8; as Hamiltonianas PT -simétricas com espectro discreto terão autovalores complexos em pares complexo conjugados de mesma multiplicidade, e portanto são pseudo-Hermiteanas por satisfazerem a segunda condição do Teorema. $\square$

Com este Teorema, é possível identificar a pseudo-Hermiticidade de uma Hamiltoniana observando seus autovalores e definindo um sistema completo biortogonal de autovetores.

4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

No curso deste trabalho, investigamos com cuidado os trabalhos de V. Bargmann (BARGMANN, 1954) e E. Wigner (WIGNER; GRIFFIN, 1959) no que tange à definição de raios vetoriais e operatoriais dentro da Mecânica Quântica, a representação de elementos de um grupo de simetria, a continuidade destas representações e finalmente, provamos com especial atenção um Teorema de fundamental importância, enunciado por E. Wigner.

Após esta análise sobre os fundamentos de uma representação de simetrias do sistema, analisamos um conceito intimamente ligado à representação de simetrias em sistemas quânticos, a Hermiticidade, e sua definição para espaços de Hilbert usuais. Com observações aos artigos de Mostafazadeh (MOSTAFAZADEH, 2002a) (MOSTAFAZADEH, 2010), buscamos expandir as possibilidades de Hamiltonianas com simetrias específicas a serem definidas sob a forma do operador pseudo-métrica, espectros possivelmente não-reais e, principalmente, a definição de um novo produto interno para acomodar a nova noção da pseudo-Hermiticidade.

A discussão da pseudo-Hermiticidade e suas muitas consequências nos levou ao refinamento da representação de autoestados de tais Hamiltonianas, utilizando do conceito de sistemas biortonormais nos possibilitando enunciar um Teorema que define as características do espectro de uma Hamiltoniana não-Hermiteana para que esta seja pseudo-Hermiteana.

A atenção às definições algébricas do espaço de Hilbert e aos novos conceitos relacionados à pseudo-Hermiticidade foram peças fundamentais para este trabalho, bem como foi de grande importância a revisão e solidificação de conceitos básicos tanto da Álgebra Linear quanto da Mecânica Quântica para sempre mantermos a coerência das teorias com as quais lidamos aqui.

Possíveis aplicações do formalismo pseudo-Hermiteano incluem candidatos à descrição de matéria escura e estudos de estados com degenerescências além do spin. Em (MOSTAFAZADEH, 2010), são discutidas várias aplicações do formalismo nas mais diversas áreas, como por exemplo o uso da pseudo-Hermiticidade em Teoria Quântica de Campos, como alternativa para eliminar campos não-físicos, ou “*ghosts*”.

Um futuro passo para este trabalho é a união dos Teoremas e definições do Capítulo 1 referente às representações de grupos e o produto pseudo-Hermiteano, definido subsequentemente. Caso seja possível abarcar ambos formalismos, poderá ser aberta uma gama de possibilidades para novas maneiras de representar simetrias com o novo produto e a pseudo-Hermiticidade como condição.

REFERÊNCIAS

- BARATA, J. C. A. **Notas para um Curso de Física-Matemática**. 2024. Disponível em: <https://denebola.if.usp.br/~jbarata/Notas_de_aula/capitulos.html>.
- BARGMANN, V. On unitary ray representations of continuous groups. **Annals of Mathematics**, Annals of Mathematics, v. 59, n. 1, p. 1–46, 1954. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/1969831>>.
- BARGMANN, V. Note on wigner's theorem on symmetry operations. **Journal of Mathematical Physics**, AIP Publishing, v. 5, n. 7, p. 862–868, 1964. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1704188>>.
- BENDER, C. M.; BOETTCHER, S. Real spectra in non-hermitian hamiltonians having PT symmetry. **Physical Review Letters**, American Physical Society (APS), v. 80, n. 24, p. 5243–5246, 1998. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.5243>>.
- BUTKOV, E. **Mathematical physics**. New York: Addison-Wesley Publishing Company, 1973.
- COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. **Quantum Mechanics**. Paris: Hermann; John Wiley & Sons, 1977.
- MOSTAFAZADEH, A. Pseudo-hermiticity versus PT symmetry: The necessary condition for the reality of the spectrum of a non-hermitian hamiltonian. **Journal of Mathematical Physics**, AIP Publishing, v. 43, n. 1, p. 205–214, 2002. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063%2F1.1418246>>.
- MOSTAFAZADEH, A. Pseudo-supersymmetric quantum mechanics and isospectral pseudo-hermitian hamiltonians. **Nuclear Physics B**, Elsevier BV, v. 640, n. 3, p. 419–434, 2002. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/S0550-3213\(02\)00347-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0550-3213(02)00347-4)>.
- MOSTAFAZADEH, A. Application of pseudo-hermitian quantum mechanics to a PT-symmetric hamiltonian with a continuum of scattering states. **Journal of Mathematical Physics**, AIP Publishing, v. 46, n. 10, 2005. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.2063168>>.
- MOSTAFAZADEH, A. Pseudo-hermitian representation of quantum mechanics. **International Journal of Geometric Methods in Modern Physics**, World Scientific Pub Co Pte Lt, v. 07, n. 07, p. 1191–1306, 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1142/S0219887810004816>>.
- SAKURAI, J. J. **Modern Quantum Mechanics**. Menlo Park: Addison-Wesley Publishing Company, 1985.
- SILVA, J. M. H. da; ROCHA, G. M. C. da. **Strongly continuous representations in the Hilbert space: a far-reaching concept**. 2021. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/2105.01717>>.
- WEINBERG, S. **Quantum theory of fields. Foundations**. New York: Cambridge University Press, 1995. v. 1.
- WIGNER, E. P.; GRIFFIN, J. J. **Group theory and its application to the quantum mechanics of atomic spectra**. Princeton: Academic Press, 1959.
- ZNOJIL, M. PT-symmetric square well. **Physics Letters A**, Elsevier BV, v. 285, n. 1–2, p. 7–10, 2001. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/S0375-9601\(01\)00301-2](http://dx.doi.org/10.1016/S0375-9601(01)00301-2)>.