Aula 13 (1/Mar)

Na aula de hoje:

* Revisão das aulas anteriores.
* Bases contínuas de $\mathcal{F}$
* Operadores lineares em $\mathcal{F}$.
* Notação de Dirac.

—— // ——

Revisão das aulas anteriores

* Aula 11 (teórica):
  - Produto escalar em $\mathcal{F}$.
  - Bases discretas ortonormais de $\mathcal{F}$.
  - Bases contínuas "ortonormais" de $\mathcal{F}$.
* Aula 12 (res. exercícios):
  - Ex. 2 Folha 3.
  - Ex. 3 Folha 3.
  - Ex. 4 Folha 3.
  - Ex. 9 Folha 3.

—— // ——

(4.2) Bases de $\mathcal{F}$ (cont.)

4.2.3) "Bases" contínuas "ortonormais" de $\mathcal{F}$ – – generalização

Generalizando bases contínuas de $\mathcal{F}$ com conjunto $\{w_\alpha(\vec{r})\}$, onde α é índice contínuo, que obedecem à relação "ortogonalidade" e relação de fecho

$$\boxed{(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \int d^3\vec{r}\; w_\alpha(\vec{r})\, w_{\alpha'}(\vec{r}) = \delta(\alpha-\alpha')}$$

$$\boxed{\int d\alpha\; w_\alpha(\vec{r})\, w_\alpha(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')}$$

Nota: Se $\alpha=\alpha' \Rightarrow (w_\alpha, w_\alpha) = \delta(0) = \infty\,! \Rightarrow w_\alpha \notin \mathcal{F}$.

Nota: α pode representar vários índices, com $\vec{r}$ e $\vec{p}$. Podemos base mista discreta e contínua

Podemos então escrever para a base contínua, as propriedades seguintes

* $\psi(\vec{r}) = \int d\alpha \; c(\alpha) . w_\alpha(\vec{r})$

* $c(\alpha) = (w_\alpha, \psi) = \int d\vec{r} . w_\alpha^*(\vec{r}) . \psi(\vec{r})$

* $(\phi, \psi) = \int d\alpha \; b^*(\alpha) . c(\alpha)$

* $N_\psi^2 = (\psi, \psi) = \int d\alpha \; |c(\alpha)|^2$

E podemos resumir a passagem entre bases discretas e contínuas como

$$i \longleftrightarrow \alpha$$

$$\sum_i \longleftrightarrow \int d\alpha$$

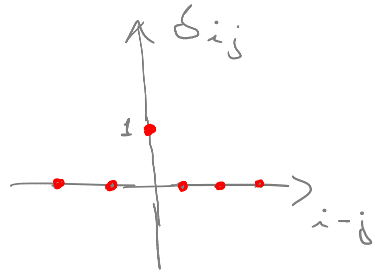
$$\delta_{ij} \longleftrightarrow \delta(\alpha - \alpha')$$

	Discrete basis $\{ u_i(\mathbf{r}) \}$	Continuous basis $\{ w_\alpha(\mathbf{r}) \}$
Ortho-normalization relation	$(u_i, u_j) = \delta_{ij}$	$(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$
Closure relation	$\sum_i u_i(\mathbf{r}) \; u_i^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$	$\int d\alpha \; w_\alpha(\mathbf{r}) \; w_\alpha^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$
Expansion of a wave function $\psi(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i \; u_i(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \int d\alpha \; c(\alpha) \; w_\alpha(\mathbf{r})$
Expression for the components of $\psi(\mathbf{r})$	$c_i = (u_i, \psi) = \int d^3r \; u_i^*(\mathbf{r}) \; \psi(\mathbf{r})$	$c(\alpha) = (w_\alpha, \psi) = \int d^3r \; w_\alpha^*(\mathbf{r}) \; \psi(\mathbf{r})$
Scalar product	$(\varphi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i$	$(\varphi, \psi) = \int d\alpha \; b^*(\alpha) \; c(\alpha)$
Square of the norm	$(\psi, \psi) = \sum_i \lvert c_i \rvert^2$	$(\psi, \psi) = \int d\alpha \; \lvert c(\alpha) \rvert^2$

Nota: Diferença entre δ_{ij} e $\delta(\alpha-\beta)$.

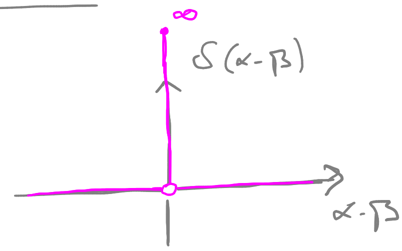
↳ δ_{ij} é o delta de Kronecker,

$$\delta_{\underbrace{ij}_{\hookrightarrow\, i-j}} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases}$$



↳ $\delta(\alpha-\beta)$ é o delta de Dirac

$$\delta(\alpha-\beta) = \begin{cases} 0, & \alpha \neq \beta \\ \infty, & \alpha = \beta \end{cases}$$



(4.3) Operadores lineares em $\mathcal{F}$

$\hat{T}$, $\hat{H}$ foram dois exemplos que já vimos no capítulo 3.

Um operador linear $\hat{A}$ é uma aplicação (endomorfismo) em $\mathcal{F}$

$$\hat{A} : \mathcal{F} \longrightarrow \mathcal{F}$$

$$\psi(\vec{r}) \longrightarrow \tilde{\psi}(\vec{r}) \equiv \hat{A}\,\psi(\vec{r})$$

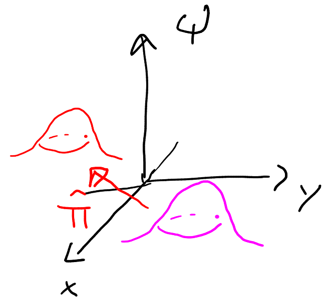
que é linear, i.e.

$$\hat{A}\left(\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2\right) = \lambda_1 \hat{A}\psi_1 + \lambda_2 \hat{A}\psi_2 .$$

Exemplos:

* Paridade, $\hat{\Pi}$

$$\hat{\Pi}\,\psi(x,y,z) = \psi(-x,-y,-z)$$



* Multiplicação por x, $\hat{X}$

$$\hat{X}\,\psi(x,y,z) = x\,\psi(x,y,z)$$

* Derivada em x, $\hat{D}_x$

$$\hat{D}_x\,\psi(x,y,z) = \frac{\partial}{\partial x}\psi(x,y,z)$$

4.3.1) Produto de dois operadores e seu comutador

Sejam $\hat{A}$ e $\hat{B}$ dois operadores lineares em $\mathcal{F}$. O seu produto é um operador $\hat{C} \equiv \hat{A}.\hat{B}$, tal que

$$\hat{C}.\psi(\vec{r}) = \hat{A}.\hat{B}\,\psi(\vec{r}) = \hat{A}\Big(\underbrace{\hat{B}\,\psi(\vec{r})}_{\phi(\vec{r})}\Big) = \hat{A}\,\phi(\vec{r}) = \chi(\vec{r})$$

ou seja, o operador $\hat{B}$ actua primeiro em $\psi(\vec{r})$, só depois actuando o operador $\hat{A}$ na nova f.o. $\phi(\vec{r}) = \hat{B}\psi(\vec{r})$.

Em geral teremos $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Chamamos então comutador de A e B ao operador

$$\boxed{[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}$$

Exemplo

$$[\hat{x},\hat{D}_x]\psi(x) = (\hat{x}\hat{D}_x - \hat{D}_x\hat{x})\psi(x)$$

$$= \hat{x}\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right) - \hat{D}_x(x\psi(x))$$

$$= x\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) - \frac{\partial}{\partial x}(x\psi(x))$$

$$= \cancel{x\frac{\partial\psi}{\partial x}} - \psi - \cancel{x\frac{\partial\psi}{\partial x}}$$

$$= -\psi(x) = -\hat{1}\,\psi(x)$$

como $\psi(x)$ é f.o. genérica podemos escrever

operador identidade

$$[\hat{x},\hat{D}_x] = -\hat{1}$$

Nota: Veremos em breve que dois operadores não comutarem está intimamente associado à existência de um princípio de incerteza entre as grandezas físicas que correspondem a esses dois operadores.

4.3.2) Auto-funções e auto-valores de um operador

Vimos no capítulo 3 a noção de auto-função e auto-valor de um operador, no contexto da separação de variáveis espaciais e temporais da eqç de Schrödinger quando o potencial sentido pela partícula é independente do tempo, i.e. $V(t, \vec{r}) = V(\vec{r})$. Nesse contexto obtivemos duas equações de auto-funções e auto-valores para os operadores $\hat{H}$, hamiltoniano, e $\hat{T}$, evolução temporal.

$$\hat{T}\,\chi(t) = E\,\chi(t)$$

$$\hat{H}\,\phi(\vec{r}) = E\,\phi(\vec{r})$$

Seja $\hat{A}$ operador linear, e f.o. $\psi(\vec{r})$ será sua auto-função se verificar

$$\hat{A}\,\psi(\vec{r}) = \alpha . \psi(\vec{r}) ,$$

onde α é um número complexo, chamado de auto-valor de $\hat{A}$ associado à auto-função $\psi(\vec{r})$.

Exemplo:

$\hat{D}_x$ e $\psi(x) = e^{ax}$

$$\Rightarrow \hat{D}_x\,\psi(x) = \frac{\partial}{\partial x} e^{ax} = a . e^{ax} = a\,\psi(x) ,$$

logo $\psi(x)$ é auto-função de $\hat{D}_x$ com auto-valor a.

$\hat{D}_x$ e $\phi(x) = 1/x$

$$\Rightarrow \hat{D}_x\,\phi(x) = \frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{x} = -\frac{1}{x^2} \neq \alpha . \phi(x) ,$$

logo $\phi(x)$ não é auto-função de $\hat{D}_x$.

4.3.3) Operadores hermíticos (hermitianos)

Uma classe importante de operadores em M.Q. são os operadores hermíticos (que veremos, estão associados a quantidades físicas observáveis). Por definição, operadores hermíticos obedecem a

$$\boxed{(\psi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\psi, \psi) \quad , \quad \forall \psi \in \mathcal{F}}$$

Exemplos:

* Paridade, $\hat{\Pi}$

$$(\psi, \hat{\Pi}\psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(\vec{r})^* \overbrace{\hat{\Pi}\, \psi(\vec{r})}^{\psi(-\vec{r})} \, d^3\vec{r}$$

$\vec{r} \to -\vec{r}$
$d\vec{r} \to -d\vec{r}$

$$= -\int_{+\infty}^{-\infty} \psi^*(-\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}) \cdot d\vec{r}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\hat{\Pi}\psi(\vec{r})\right)^* \psi(\vec{r}) \, d\vec{r}$$

$$= (\hat{\Pi}\psi, \psi)$$

ou seja, $\hat{\Pi}$ é hermítico.

* Multiplicação por x, $\hat{x}$:

$$(\psi, \hat{x}\psi) = \int \psi^*(\vec{r})\, x \,.\, \psi(\vec{r})\, d^3\vec{r}$$

$$= \int \left(x\,\psi(\vec{r})\right)^* .\, \psi(\vec{r})\,.\, d\vec{r}$$

$$= (\hat{x}\psi, \psi)$$

ou seja, $\hat{x}$ também é hermítico.

* Derivada em x, $\hat{D}_x$:

$$(\psi, \hat{D}_x\psi) = \int \underbrace{\psi^*(\vec{r})}_{u} .\, \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}\psi(\vec{r})}_{v'}\, d^3\vec{r}$$

$$= \underbrace{\cancel{\left[\psi^*(\vec{r})\,\psi(\vec{r})\right]_{-\infty}^{+\infty}}}_{0} - \int \left(\frac{\partial}{\partial x}\psi(\vec{r})\right)^* .\, \psi(\vec{r})\, d^3\vec{r}$$

$$= -(\hat{D}_x\psi, \psi)$$

ou seja, $\hat{D}_x$ não é hermítico (é anti-hermítico).

4.3.4) Operadores lineares e bases de $\mathcal{F}$

Vimos que operador em $\mathcal{F}$, $\hat{O}$, actuando numa f.o. de $\psi \in \mathcal{F}$, a transforma numa outra f.o. $\phi \in \mathcal{F}$.

$$\hat{O}\,\psi(\vec{r}) = \phi(\vec{r})$$

Se estivermos a trabalhar numa dada base de $\mathcal{F}$, $\{u_i(\vec{r})\}$, então poderemos escrever

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i\, u_i(\vec{r})$$

$$\phi(\vec{r}) = \sum_i b_i\, u_i(\vec{r})$$

bem como

$$\hat{O}\,\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i \underbrace{\hat{O}\,.\,u_i(\vec{r})}_{\parallel}$$

$$= \sum_i c_i\,.\,\overbrace{v_i(\vec{r})}$$

que são em geral $v_i(\vec{r}) = \sum_j a_j^{(i)}\,.\,u_j(\vec{r})$,

e assim

$$\hat{O}\,\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i \sum_j a_j^{(i)}\, u_j(\vec{r})$$

$$= \sum_{i,j} c_i\, a_j^{(i)} \cdot u_j(\vec{r})$$

$$= \sum_j \underbrace{\left[\sum_i c_i\, a_j^{(i)}\right]}_{= b_j} \cdot u_j(\vec{r})$$

$$= \sum_j b_j\, u_j(\vec{r})$$

Por analogia com espaço vectorial 3D em que vector $\vec{v}$ na base $\{e_i\}$, $i = 1, 2, 3$,

$$\vec{v} = v_1\, \vec{e}_1 + v_2\, \vec{e}_2 + v_3\, \vec{e}_3$$

que podemos escrever em linguagem matricial invocando apenas componentes v_i,

$$\vec{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} \begin{array}{l} \longrightarrow \text{componente do versor } \vec{e}_1 \\ \longrightarrow \quad \text{"} \quad \text{"} \quad \text{"} \quad \vec{e}_2 \\ \longrightarrow \quad \text{"} \quad \text{"} \quad \text{"} \quad \vec{e}_3 \end{array}$$

Isto permite-nos expressar produto escalar de $\vec{u}$ e $\vec{v}$ como multiplicação de vector coluna e de vector linha,

$$\vec{u}\cdot\vec{v} = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & u_3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} = u_1 v_1 + u_2 v_2 + u_3 v_3$$

No espaço vectorial $\mathcal{F}$, também será útil escrever f.o como vector das componentes na base $\{u_i(\vec{r})\}$

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_i c_i\, u_i(\vec{r}) = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{bmatrix} \begin{array}{l} \rightarrow \text{componente de } u_1 \\ \rightarrow \quad \text{"} \qquad \text{"} \quad u_2 \\ \qquad \vdots \qquad\quad \vdots \\ \rightarrow \quad \text{"} \qquad \text{"} \quad u_n \\ \end{array}$$

Nesta notação matricial, os operadores serão matrizes, pois levam um vector coluna (i.e. uma f.o.) para outro vector coluna (i.e. outra f.o.), ou seja

$$\hat{O}\,\Psi(\vec{r}) = \Phi(\vec{r})$$

$$\Leftrightarrow \sum_i c_i \sum_j o_j^{(i)}\, u_j(\vec{r}) = \sum_j b_j\, u_j(\vec{r})$$

$$\Leftrightarrow \sum_j \left[\sum_i c_i\, o_j^{(i)}\right] u_j(\vec{r}) = \sum_j b_j\, u_j(\vec{r})$$

$$\Leftrightarrow \underbrace{\begin{bmatrix} a_1^{(1)} & a_1^{(2)} & a_1^{(3)} & \cdots \\ a_2^{(1)} & a_2^{(2)} & a_2^{(3)} & \cdots \\ a_3^{(1)} & a_3^{(2)} & a_3^{(3)} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{bmatrix}} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} a_1^{(1)} \cdot c_1 + a_1^{(2)} c_2 + a_1^{(3)} c_3 + \dots \\ a_2^{(1)} c_1 + a_2^{(2)} c_2 + a_2^{(3)} c_3 + \dots \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_i a_1^{(i)} c_i \\ \sum_i a_2^{(i)} c_i \\ \vdots \end{bmatrix}$$

$$\| \qquad b_j = \sum_i c_i a_j^{(i)}$$

<u>Nota</u>: Acabamos de introduzir uma notação matricial para tratar problemas de mecânica quântica.

↳ Mecânica "Matricial" (por Heisenberg).

(4.4) <u>Notação de Dirac</u>

4.4.1) <u>Espaço de Estados $\mathcal{E}$</u>

Em 4.3 vimos que podemos usar notação matricial, em que referimos apenas componentes de f.o. e de operadores numa dada base $\{u_i(\vec{r})\}$.

Vimos também que as bases de $\mathcal{F}$, sejam elas contínuas ou discretas, finitas ou infinitas, estão em pé de igualdade

Base	Componentes $\psi(\vec{r})$
$u_i(\vec{r})$	c_i
$v_p(\vec{r})$	$\hat{\psi}(p)$
$\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$	$\psi(\vec{r}_0)$
$w_\alpha(\vec{r})$	$c(\alpha)$

Vamos então usar uma notação mais geral e análoga à que usamos com espaços vectoriais 2D e 3D:

* Estado quântico de uma partícula será caracterizado por um vector de estado.

* O vector de estado fará parte de um espaço abstrato $\mathcal{E}$, chamado de espaço de estados (de uma partícula).

* Como $\mathcal{F}$ é subespaço de L^2, então $\mathcal{E}$ também é um espaço Hilbert.

Nota: Na verdade, $\mathcal{E}$ é um espaço mais geral do que $\mathcal{F}$, pois nem todos os estados quânticos de uma partícula são descritos por uma função (de onda) de $\mathcal{F}$.

↳ Por exemplo, para descrever partícula com spin, precisaremos de f.o. $\psi \in \mathcal{F}$, mas também de especificar spin da partícula.

4.4.2) Vectores "ket" e vectores "bra".

4.4.2.1) Vectores "ket"

Um elemento de $\mathcal{E}$ será chamado de "ket" e será representado por $| \; \rangle$, por exemplo $|\psi\rangle$.

Por exemplo, para partícula sem spin, com f.o. $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$, vamos usar $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$, eliminando referência a $\vec{r}$ que faz menção a uma base específica de $\mathcal{E}$.

↳ Neste caso $\mathcal{F}$ e $\mathcal{E}$ são isomórficos (i.e. têm correspondência de 1-para-1, ou seja, a cada f.o. $\psi \in \mathcal{F}$ corresponde estado $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$).

↳ $\psi(\vec{r})$ são os componentes de $|\psi\rangle$ na base das funções delta de Dirac $\{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\}$, onde $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta(\vec{r}-\vec{r}_0)$.