Aula 16 (8/Mar)

<u>Na aula de hoje:</u>

* Revisão das aulas anteriores.
* Observáveis e C.C.O.C.s.
* Exemplos importantes: $\{|\vec{r}\rangle\}$ e $\{|\vec{p}\rangle\}$, $\hat{\vec{R}}$ e $\hat{\vec{P}}$.
* Produto tensorial.

—— // ——

Revisão da aula anterior

* Representação de kets, bras e operadores.
* Mudança de representação.
* Auto-valores e auto-vectores de operador.

—— // ——

4.5 Observáveis

4.5.1) Auto-valores e auto-vectores de um operador (cont.)

Operadores hermíticos

(i) É possível mostrar que op. hermíticos, $\hat{A} = \hat{A}^{+}$, têm sempre $p = q$, ou seja serão sempre diagonalizáveis, tendo q auto-vectores associados a um auto-valor q-degenerado.

(ii) O auto-valores de op. hermítico são reais.

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \lambda \langle \psi | \psi \rangle \xRightarrow{\text{operação conjugação hermítica}} \langle \psi | \hat{A}^{+} | \psi \rangle = \lambda^{*} \langle \psi | \psi \rangle$$

$$\Leftrightarrow \underbrace{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}_{\lambda \langle \psi | \psi \rangle} = \lambda^{*} \langle \psi | \psi \rangle$$

$$\Longrightarrow \lambda = \lambda^{*} \Longrightarrow \lambda \text{ é real.}$$

(iii) Dois auto-vectores de op. hermítico associados a auto-valores diferentes são ortogonais

$$\begin{matrix} \hat{A} | \psi \rangle = \lambda | \psi \rangle \\ \hat{A} | \phi \rangle = \mu | \phi \rangle \end{matrix} \quad \xRightarrow{\text{conj. herm.}} \quad \begin{matrix} \langle \psi | \hat{A} = \langle \psi | \lambda \\ \langle \phi | \hat{A} = \langle \phi | \mu \end{matrix}$$

e então teremos que $\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle$ será

$$\lambda \langle \phi | \psi \rangle = \langle \phi | \left(\hat{A} | \psi \rangle \right) = \left(\langle \phi | \hat{A} \right) | \psi \rangle = \mu \langle \phi | \psi \rangle$$

que como $\lambda \neq \mu$ implica que $\langle \phi | \psi \rangle = 0$. $\square$

4.5.2) Definição de observável

Argumentamos antes que se $\mathcal{E}$ tem dimensão finita então é sempre possível diagonalizar operador hermítico, ou seja, podemos sempre formar base de $\mathcal{E}$ com auto-vectores desse operador.

↳ Nessa base $\{|\psi_n^i\rangle\}$, tal que $\hat{A}|\psi_n^i\rangle = a_n|\psi_n^i\rangle$, (com $i = 1, \ldots, g_n$) teremos $\hat{A}$ diagonal

degenerescência do auto-valor a_n

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} \ddots & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \ddots \end{bmatrix}.$$

Mas isto não é em geral verdade se $\mathcal{E}$ tem dimensão infinita. Por isso será útil definir o conceito de observável.

Definição: Uma observável é op. hermítico, cujo conjunto de auto-vectores, qd ortonormalizado, forma base ortonormal de $\mathcal{E}$.

Nota: Vamos usar $|\varphi_n^i\rangle$ para auto-vectores de $\hat{A}$, onde $i = 1, \dots, g_n$ identifica a degenerescência do auto-valor a_n,

$$\hat{A}|\varphi_n^i\rangle = a_n|\varphi_n^i\rangle \quad , \quad i = 1, \dots, g_n .$$

Temos que auto-vectores associados a a_n formam sub-espaço $\mathcal{E}_n$, e são ortogonais a auto-vectores de outro sub espaço $\mathcal{E}_m$ associados ao auto-valor a_m com $m \neq n$, i.e

$$\langle \varphi_m^i | \varphi_n^j \rangle = 0 \qquad \text{se } n \neq m.$$

Dentro de cada sub-espaço $\mathcal{E}_n$ podemos sempre escolher um conjunto de auto-vectores ortogonais entre si, i.e.

$$\langle \varphi_n^i | \varphi_n^j \rangle = \delta_{ij}$$

e assim, o op. hermítico ser observável implica que possamos exprimir qq estado de $\mathcal{E}$ em termos desse conjunto ortonormal de auto-vectores, i.e.

$$\boxed{\sum_{n=1} \sum_{i=1}^{g_n} |\psi_n^i\rangle\langle\psi_n^i| = \hat{1}}$$

↳ relação fecho

<u>Nota</u>: Projector no sub-espaço $\mathcal{E}_n$, é definido pelos $\{|\psi_n^i\rangle\}$, $i = 1, \ldots, g_n$,

$$\hat{P}_n = \sum_{i=1}^{g_n} |\psi_n^i\rangle\langle\psi_n^i|$$

e assim

$$\hat{A} = \sum_n a_n \sum_i^{g_n} |\psi_n^i\rangle\langle\psi_n^i|$$

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} a_1 & & & & & \\ & a_2 & & & & 0 \\ & & a_2 & & & \\ & & & a_2 & & \\ & 0 & & & a_2 & \\ & & & & & a_3 & \\ & & & & & & \ddots \end{bmatrix}$$

Nota: Esta definição de observável é facilmente generalizável para bases contínuas ou bases que são mistura de contínua e discreta.

4.5.3) Conjuntos de observáveis que comutam

Quando duas observáveis $\hat{A}$ e $\hat{B}$ comutam, $[\hat{A},\hat{B}]=0$, podemos obter resultados importantes.

Teorema I: Se dois operadores $\hat{A}$ e $\hat{B}$ comutam, e se $|\psi\rangle$ é auto-vector de $\hat{A}$ com auto-valor $\underline{a}$, então $\hat{B}|\psi\rangle \equiv |\phi\rangle$ também é auto-vector de $\hat{A}$ com auto-valor $\underline{a}$.

Demonstração: Se $\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$, então

$$\hat{B}\hat{A}|\psi\rangle = a\hat{B}|\psi\rangle$$

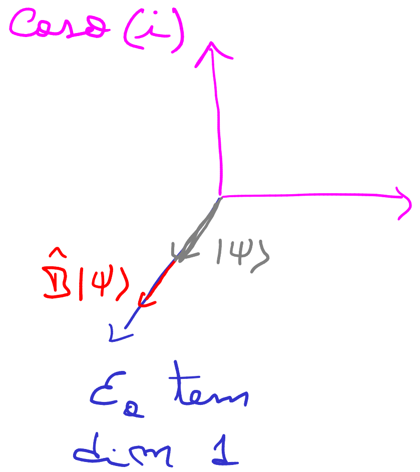
$$\overset{[\hat{A},\hat{B}]=0}{\Leftrightarrow} \hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = a\hat{B}|\psi\rangle \Leftrightarrow \hat{A}|\phi\rangle = a|\phi\rangle$$

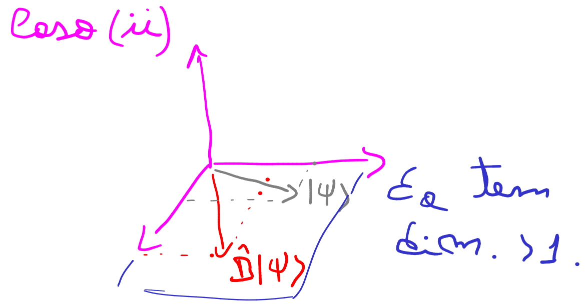
□

Mas podemos ter 2 casos distintos:

(i) Se $\underline{a}$ é não-degenerado, então $\hat{B}|\psi\rangle$ é colinear a $|\psi\rangle$ (sub-espaço dimensão 1) e então $|\psi\rangle$ também é auto-vector de $\hat{B}$.

(ii) Se a é degenerado, então $\hat{B}|\psi\rangle \in \mathcal{E}_a$ e então dizemos que $\mathcal{E}_a$ é invariante pela acção de $\hat{B}$.





<u>Teorema II</u>: Se os observáveis A e B comutam, e se $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ são auto-vectores de $\hat{A}$ com auto-valores diferentes, então temos que $\langle\psi_1|\hat{B}|\psi_2\rangle = 0$.

<u>Demonstração</u>: Se $\hat{A}|\psi_1\rangle = a_1|\psi_1\rangle$ e $\hat{A}|\psi_2\rangle = a_2|\psi_2\rangle$ com $a_1 \neq a_2 \Rightarrow \langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$. Mas então $\hat{B}|\psi_1\rangle$ terá $\hat{A}(\hat{B}|\psi_1\rangle) = a_1\hat{B}|\psi_1\rangle$ e assim teremos que $\langle\psi_2|\hat{B}|\psi_1\rangle = 0$.

<u>Teorema III</u> (<u>fundamental</u>): Se dois observáveis $\hat{A}$ e $\hat{B}$ comutam, podemos construir base ortonormal de $\mathcal{E}$ com auto-vectores comuns a $\hat{A}$ e a $\hat{B}$. $\Rightarrow$ <u>$\hat{A}$ e $\hat{B}$ simultaneamente diagonais</u>.

Demonstração: Consideremos base ortonormal composta por auto-vecs de $\hat{A}$, i.e. $\{|\varphi_n^i\rangle\}$ com $i = 1, \dots, g_n$,

$$\langle \varphi_n^i | \varphi_m^j \rangle = \delta_{nm}\,\delta_{ij}.$$

Do teorema II temos que $\langle \varphi_1 | \hat{B} | \varphi_2 \rangle = 0$ e assim em geral $\hat{B}$ nesta base será matriz diagonal por blocos, i.e.

$$\hat{B} = \begin{array}{c} \\ \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \vdots \end{array}\begin{array}{c} \begin{array}{cccc} \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \cdots \end{array} \\ \left[\begin{array}{c|c|c|c} & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \end{array}\right] \end{array}$$

tamanho é $g_3 \times g_3$

Mas podemos escolher qualquer base de um sub-espaço $\mathcal{E}_n$ $\{|\varphi_n^i\rangle\}$ sem afectar representação de $\hat{A}$, i.e.

$$|\phi\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} c_i\,|\varphi_n^i\rangle,$$

então $\hat{A}|\phi\rangle = a_n|\phi\rangle$, para qualquer conjunto de c_i's.

Então poderemos escolher base de de $\mathcal{E}$ em que $\hat{B}$ e $\hat{A}$ são diagonais, i.e. $\{|u_i^{(m)}\rangle\}$ de $\mathcal{E}_m$ tal que

$$\langle u_i^{(m)}|\hat{A}|u_j^{(m)}\rangle = a_m \cdot \delta_{ij} \cdot \delta_{mm}$$

$$\langle u_i^{(m)}|\hat{B}|u_j^{(m)}\rangle = \beta_i^{(m)} \cdot \delta_{ij} \cdot \delta_{mm}$$

Nota: Teremos então base do $\mathcal{E}$ formada por auto-vectores comuns a $\hat{A}$ e $\hat{B}$.

Nota: Usaremos $|u^i_{m,p}\rangle$ para os elementos da base,

índice identificando auto-valor de $\hat{B}$.

índice identificando auto-valor de $\hat{A}$.

$$\hat{A}|u^i_{m,p}\rangle = a_m|u^i_{m,p}\rangle$$

$$\hat{B}|u^i_{m,p}\rangle = b_p|u^i_{m,p}\rangle$$

onde o índice $\underline{\underline{i}}$ identifica eventuais degenerescências do par de auto valores (a_m, b_p).

Exemplo: Elementos da base identificados pelos pares:

$(1,1)$, $(1,2)$, $(1,3)$, $(2,5)$, $(2,6)$

$g=1$ $\quad$ $g=2$ $\quad$ $g=1$ $\quad$ $g=1$

4.5.4) C.C.O.C. — Conjuntos Completos de Observáveis que Comutam

Definição: Um conjunto de observáveis $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \ldots$, diz-se um C.C.O.C. se

(i) todos os pares de observáveis comutarem;

(ii) especificando o auto-valor de todos os observáveis, determinamos unicamente cada auto-vector;

(iii) retirando uma destes observáveis do conjunto, (ii) deixa de ser obedecido $\Leftrightarrow$ o conjunto é minimal;

Usaremos a notação $|a_n, b_p, c_r, \ldots\rangle$ para identificar unicamente cada elemento da base ortonormal de $\mathcal{E}$ (que são auto-vectores de $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \ldots$ com auto-valores $a_n, b_p, c_r, \ldots$).

Nota: Para um dado sistema físico existem vários C.C.O.C.

4.5.5) Exemplo importante

Vamos agora olhar para os operadores (vectoriais) $\hat{\vec{R}} \equiv (\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z})$ e $\hat{\vec{P}} \equiv (\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z)$ e construir C.C.O.Cs.

Mas antes vamos olhar duas representações: representação $\{|\vec{r}\rangle\}$ e $\{|\vec{p}\rangle\}$.