# Aula 2 Operadores

A função de onda espacial satisfaz

$$-i\hbar \vec{\nabla} \psi(\vec{x}) = \vec{p}\, \psi(\vec{x})$$

Neste caso então podemos identificar o operador momento

$$\vec{p} \longrightarrow -i\hbar \vec{\nabla}$$

atuando sobre $\psi(\vec{x})$. É um operador diferencial.
Similarmente, tínhamos visto que

$$E\,\psi(\vec{x}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\right]\psi(\vec{x})$$

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

onde $\hat{H}$ é o operador hamiltoniano

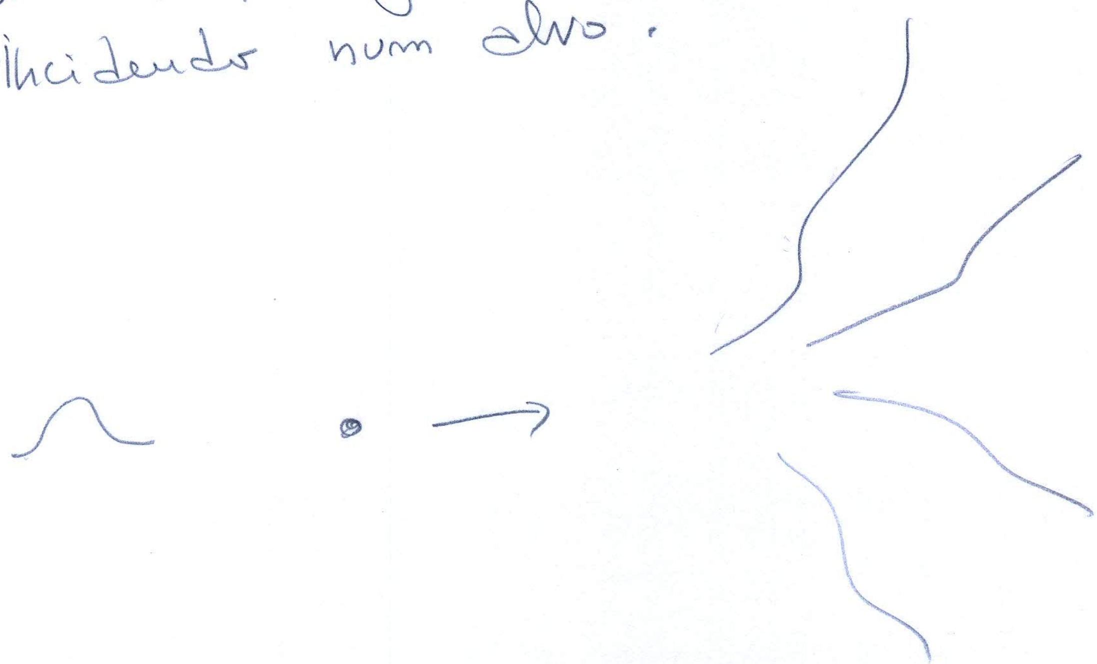
Em geral, os observáveis físicos estão associados a operadores. E.g.

$$\hat{\vec{x}}\,\psi(\vec{x}) = \vec{x}\,\psi(\vec{x}) \quad ; \text{ etc.}$$

## Interpretação Probabilística de $\psi(\vec{x},t)$ 

$\psi(\vec{x},t)$ não representa a partícula espalhada no espaço, com a maior parte da partícula concentrada em alguma região onde $\psi(\vec{x},t)$ é maior.

<u>Born</u> estudou o espalhamento de $\psi(\vec{x},t)$ dado inicialmente por um "pacote" de ondas, i.e. uma $\psi(\vec{x},t)$ grandemente concentrada numa região, incidindo num alvo.



O pacote de ondas é uma combinação de ondas planas:

$$\psi(\vec{x},t) = \int d^3k \, g(\vec{k}) \, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega t)},$$

Born mostrou (veremos isso em MQ II) que (3)
a função de onda depois do espalhamento
espalha em todas as direções e que sua
magnitude decresce como $\frac{1}{r}$, onde r
é a distância ao alvo.
Isto contradiz a interpretação de $\Psi(\vec{x}, t)$
como refletindo a "concentração" da partícula,
como se fosse a densidade da partícula
espalhada no espaço. Os experimentos
mostraram (mostram) que é espalhada contra
um alvo e redirecionada, mas não se "quebra"
em todas as direções possíveis, tal como
a solução de Born sugere.

Born propõe que $\Psi(\vec{x}, t)$ controla a
probabilidade da posição da partícula
em $\vec{x}$ e no tempo $t$.

$$\Rightarrow \boxed{dP = |\Psi(\vec{x}, t)|^2 \, d^3x}$$

é a probabilidade da partícula estar num volume
$d^3x$ ao redor de $\vec{x}$ no instante $t$

Portanto, temos que

$$\int |\psi(\vec{x},t)|^2 \, d^3x = 1$$

$\Rightarrow$ { Probabilidade da partícula estar em algum lugar é 100%!

Essa condição sempre pode ser satisfeita se a integral é uma constante finita $N$ e então reabsorver ele na definição de $\psi$: dividindo por $\sqrt{N}$.

Mas é muito importante que a integral seja finita. Isto é um vínculo ainda mais restritivo do que pedir que a função de onda seja $\rightarrow 0$ no infinito (Schrödinger).

A integral é a probabilidade total. Portanto deve ser conservada.

Para ver isso voltamos à equação de Schrödinger:

Sabendo que

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*(\vec{x},t)}{\partial t} = \left(H\,\Psi(\vec{x},t)\right)^*$$

tomamos a derivada total da integral:

$$i\hbar \frac{d}{dt}\int d^3x\,|\Psi(\vec{x},t)|^2 = i\hbar\int \Psi^*(\vec{x},t)\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x},t)\,d^3x$$

$$+i\hbar\int\left(\frac{\partial \Psi^*(\vec{x},t)}{\partial t}\right)\Psi(\vec{x},t)\,d^3x$$

$$= \int \Psi^*(\vec{x},t)\,H\Psi(\vec{x},t)\,d^3x$$

$$-\int (H\Psi)^*(\vec{x},t)\,\Psi(\vec{x},t)\,d^3x$$

Isto deveria ser Zero para provar que a probabilidade é conservada.
Para isso precisamos que H tenha uma propriedade tal que

$$\int f^*(Hg) = \int (Hf)^* g$$

onde $f$ e $g$ são funções que $\to 0$ no $\infty$ e as integrais são em alguma variável de $f, g$ / $\vec{x}$.
Se o operador $H$ satisfaz essa identidade ele é chamado de <u>operador hermitiano</u> (mais formalmente nas próximas aulas).

De fato, usando o Hamiltoniano

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x)$$

é possível mostrar que

$$\frac{\partial|\Psi(\vec{x},t)|^2}{\partial t} = \frac{\partial \Psi^*(\vec{x},t)}{\partial t}\Psi(\vec{x},t) + \Psi^*(\vec{x},t)\frac{\partial \Psi(\vec{x},t)}{\partial t}$$

$$= +\frac{i}{\hbar}\left(H\Psi(\vec{x},t)\right)^*\Psi(\vec{x},t) - \frac{i}{\hbar}\Psi^*(\vec{x},t)\,H\Psi(\vec{x},t)$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}\left(\nabla^2\Psi^*(\vec{x},t)\right)\Psi(\vec{x},t) + \frac{i\hbar}{2m}\Psi^*(\vec{x},t)\nabla^2\Psi(\vec{x},t)$$

usando que

$$\vec{\nabla}\cdot\left(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi\right) = \vec{\nabla}\Psi^*\cdot\vec{\nabla}\Psi + \Psi^*\nabla^2\Psi$$

e analogamente para $\vec{\nabla}\cdot\left(\Psi\vec{\nabla}\Psi\right)$ temos que

$$\frac{\partial|\Psi(\vec{x},t)|^2}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\vec{\nabla}\cdot\left(\Psi^*_{(\vec{x},t)}\vec{\nabla}\Psi(\vec{x},t) - \Psi_{(\vec{x},t)}\vec{\nabla}\Psi^*_{(\vec{x},t)}\right)$$

Dado que $|\Psi(\vec{x},t)|^2$ é a <u>densidade de probabilidade</u> ao redor de $\vec{x}$, esse resultado pode ser comparado com

$$\frac{\partial\rho(\vec{x},t)}{\partial t} = \vec{\nabla}\cdot\vec{J}(\vec{x},t)$$ do eletromagnetismo

$\Rightarrow$ equação de continuidade: conservação da <u>probabilidade</u>, em lugar da <u>carga elétrica</u>.

A densidade de corrente de probabilidade é

$$\vec{J}(\vec{x},t) \equiv \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*_{(\vec{x},t)}\vec{\nabla}\Psi(\vec{x},t) - \Psi_{(\vec{x},t)}\vec{\nabla}\Psi^*_{(\vec{x},t)}\right)$$

A interpretação probabilística permite que (1)
calculemos valores médios (ou valores esperados).
Por exemplo, se temos uma função $f(\vec{x})$,
seu valor esperado é

$$\langle f \rangle = \int f(\vec{x})\, |\Psi(\vec{x},t)|^2\, d^3x$$

dado que $dP = |\Psi(\vec{x},t)|^2 d^3x$.

Para ser mais correto, se $\hat{\vec{x}}$ é um operador,
então $\hat{f}(\hat{\vec{x}})$ é o operador tal que

$$f(\hat{\vec{x}})\,\Psi(\vec{x},t) = f(\vec{x})\,\Psi(\vec{x},t)$$

$$\Rightarrow \langle f \rangle = \int \Psi^*(\vec{x},t)\, f(\hat{\vec{x}})\,\Psi(\vec{x},t)$$

é o valor esperado do <u>operador</u> $f(\hat{\vec{x}})$

Em geral, o valor esperado de um operador
é dado por

$$\langle A \rangle = \int \Psi^*(\vec{x})\, [A\Psi](\vec{x})\, d^3x$$

(a tempo fixo $t$) onde $A$ é um <u>observável</u> físico

Mas se A é um observável isto quer dizer que $\langle A \rangle$ é um número real.

Portanto,

$$\langle A \rangle^* = \int [A\psi(\vec{x})]^* \psi(\vec{x}) = \langle A \rangle = \int \psi^*(\vec{x}) [A\psi(\vec{x})]$$

$\Rightarrow$ A deve ser um operador hermitiano

## Comutadores e Operadores Incompatíveis

Vimos que o operador momento atuando na função de onde é

$$\hat{\vec{P}}\,\psi(\vec{x},t) = -i\hbar\,\vec{\nabla}\psi(\vec{x},t)$$

Também que o operador posição atua como

$$\hat{\vec{X}}\,\psi(\vec{x},t) = \vec{x}\,\psi(\vec{x},t)$$

Então:

$$\hat{\vec{X}}.\hat{\vec{P}}\,\psi(\vec{x},t) = \hat{\vec{X}}.(-i\hbar)\vec{\nabla}\psi(\vec{x},t) = -i\hbar\,\vec{x}.\vec{\nabla}\psi(\vec{x},t)$$

$$\hat{\vec{P}}.\hat{\vec{X}}\,\psi(\vec{x},t) = (-i\hbar)\vec{\nabla}.(\vec{x}\,\psi(\vec{x},t)) \Rightarrow \text{não comutam!}$$

Para simplificar, uma dimensão.

$$\hat{x}\,\Psi(x,t) = x\,\Psi(x,t) \qquad \hat{p}\,\Psi(x,t) = -i\hbar\,\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}$$

$$\Rightarrow \hat{x}\hat{p}\,\Psi(x,t) = \hat{x}\,(-i\hbar)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x} = (-i\hbar)\,x\,\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}$$

MAS

$$\hat{p}\hat{x}\,\Psi(x,t) = (-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}\left(\hat{x}\,\Psi(x,t)\right) = (-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}\left(x\,\Psi(x,t)\right)$$

$$= (-i\hbar)\,\Psi(x,t) + (-i\hbar)\,x\,\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}$$

$$\Rightarrow \left[\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}\right]\Psi(x,t) = i\hbar\,\Psi(x,t)$$

$$\Rightarrow \boxed{[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar}$$

operadores $\hat{x}$ e $\hat{p}$ não comutam!

em geral, teremos observáveis que não comutam, chamados de incompatíveis. Porque?

Para começar a ver a resposta vamos considerar a ação de operadores na função de onda →

Pergunta : A função de onda $\Psi(\vec{x},t)$ representa um estado. Qual a condição para que um observável **A** dado tenha um valor definido (real) a nesse estado?

Para responder calculamos o valor esperado do operador $(A-a)^2$

$$\langle (A-a)^2 \rangle = \int \Psi^*(\vec{x}) \left[(A-a)^2 \Psi\right](\vec{x})\, d^3x$$

$$= \int \left[(A-a)\Psi\right]^*(\vec{x}) \left[(A-a)\Psi\right](\vec{x})\, d^3x$$

Pq. A é Hermitiano $\Rightarrow$ A-a também

$$\Rightarrow \langle (A-a)^2 \rangle = \int \left| \left[(A-a)\Psi\right](\vec{x}) \right|^2 d^3x$$

Se o estado representado por $\Psi(\vec{x},t)$ tem um valor definido a do operador A então $\langle (A-a)^2 \rangle = 0$

$$\Rightarrow \boxed{[A\Psi](\vec{x}) = a\,\Psi(\vec{x})}$$

eq. função de autovalores

$\Psi(\vec{x})$ autofunção do operador A com autovalor a

Mas então, agora podemos provar que um estado, descrito pela função de onda $\psi$, não pode ter valores definidos da posição (operador $\hat{x}$ com autovalor $x$) e do momento (operador $\hat{p}$ com autovalor $p$).

As equações de autovalores seriam

$$\hat{x}\psi = x\psi \quad \text{e} \quad \hat{p}\psi = p\psi$$

Mas se isso fosse verdade, teríamos que

$$\left.\begin{array}{l} \hat{x}\hat{p}\psi = p\hat{x}\psi = px \\ \text{e} \\ \hat{p}\hat{x}\psi = x\hat{p}\psi = xp \end{array}\right\} \Rightarrow \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = 0 \quad \text{ou} \quad [\hat{x},\hat{p}] = 0$$

Mas sabemos que

$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \neq 0!$$

$\Rightarrow$ Não é possível que um estado tenha o momento e a posição com valores definidos ao mesmo tempo.

Dessa incompatibilidade, vamos derivar o princípio de incerteza formalmente.

Em geral, dois observáveis A e B podem ter valores definidos no mesmo estado se

$$(AB - BA)\psi = 0$$

ou se $\boxed{[A, B] = 0}$ $\Rightarrow$ se os operadores associados comutam