Aula 3

I) Funções de Operadores:

- Escalares no espaço vetorial (reais ou complexos) são chamados de c-números (c: clássicos)
- Operadores são chamados de q-números dado que em geral não comutam.

A questão é: quais as propriedades de funções de q-números?

Para começar, consideremos a função f(x) definida pela série

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

onde x é um c-número (e os a_n também)

Podemos definir a função do operador Ω dada como

$$f(\Omega) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \Omega^n$$

Por exemplo, imaginemos o caso da função exponencial

$$f(\Omega) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Omega^n}{n!} \equiv e^{\Omega}$$

Se Ω é hermitiano, ele pode ser representado pela matriz diagonal dos autovalores

$$\Omega = \begin{pmatrix} \omega_1 & & & \\ & \omega_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \omega_n \end{pmatrix}$$

Portanto,

$$\Omega^p = \begin{pmatrix} \omega_1^p & & & \\ & \omega_2^p & & \\ & & \ddots & \\ & & & \omega_n^p \end{pmatrix}$$

e

$$\sum_{p=0}^{\infty} \frac{\Omega^p}{p!} = \begin{pmatrix} \sum_p \frac{\omega_1^p}{p!} & & & \\ & \sum_p \frac{\omega_2^p}{p!} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sum_p \frac{\omega_n^p}{p!} \end{pmatrix}$$

$$= e^{\Omega}$$

Dado que os somas dos autovalores convergem obtemos

$$e^{\Omega} = \begin{pmatrix} e^{\omega_1} & & & \\ & e^{\omega_2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & e^{\omega_n} \end{pmatrix}$$

II) Derivadas de operadores

Consideremos um operador $\Omega(\lambda)$ que depende de um parâmetro λ.

A derivada do operador Ω respeito do λ é definida por

$$\frac{d\Omega(\lambda)}{d\lambda} \equiv \lim_{\Delta\lambda \to 0} \frac{\Omega(\lambda+\Delta\lambda) - \Omega(\lambda)}{\Delta\lambda}$$

Se o operador $\Omega(\lambda)$ é dado por uma matriz numa dada base, a derivada de $\Omega(\lambda)$ é obtida derivando os elementos de matriz correspondentes.

Por exemplo, um caso típico e dos usados é

$$\Omega(\lambda) = e^{\lambda\Theta}$$

onde Θ é um operador hermitiano.

Na base de autoestados de Θ, é possível mostrar que (ver acima)

$$\frac{d\Omega(\lambda)}{d\lambda} = \Theta e^{\lambda\Theta} = \Theta\Omega(\lambda)$$

Mas dado que $[\Theta,\Theta]=0 \Rightarrow$

$$\frac{d\Omega(\lambda)}{d\lambda} = e^{\lambda\Theta}\Theta = \Omega(\lambda)\Theta$$

Mesmo que Θ não seja hermitiano temos que

$$\frac{d}{d\lambda} e^{\lambda\Theta} = \frac{d}{d\lambda}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\lambda^m\Theta^m}{m!} = \sum_{m=1}^{\infty}\frac{m\lambda^{m-1}\Theta^m}{m!}$$

$$= \Theta\sum_{m=1}^{\infty}\frac{\lambda^{m-1}\Theta^{m-1}}{(m-1)!} = \Theta\sum_{r=0}^{\infty}\frac{\lambda^r\Theta^r}{r!}$$

$$\frac{d\Omega(\lambda)}{d\lambda} = \Theta e^{\lambda\Theta} = \Theta\Omega(\lambda)$$

Então, nesses casos a derivada se comporta como se fosse uma derivada normal.

Mas quando temos mais de um operador devemos levar em consideração que em geral eles não comutam.

Exemplo 1

$$e^{\alpha\Omega} e^{\beta\Omega} = e^{(\alpha+\beta)\Omega} \quad ✓$$

Porém

$$e^{\alpha\Omega} e^{\beta\Theta} \neq e^{(\alpha\Omega+\beta\Theta)} \quad \times$$

(verificar)

Exemplo 2

$$\frac{d}{d\lambda}\left[e^{\lambda\Omega} e^{\lambda\Theta}\right] = \Omega e^{\lambda\Omega} e^{\lambda\Theta} + e^{\lambda\Omega}\,\Theta\, e^{\lambda\Theta}$$

Mas se $[\Omega,\Theta] \neq 0$,

$$\Omega e^{\lambda\Theta} \neq e^{\lambda\Theta}\Omega$$

Espaços de Dimensão Infinita:

Até agora consideramos espaços vetoriais de dimensão finita. Vamos a generalizar para um número infinito de dimensões.

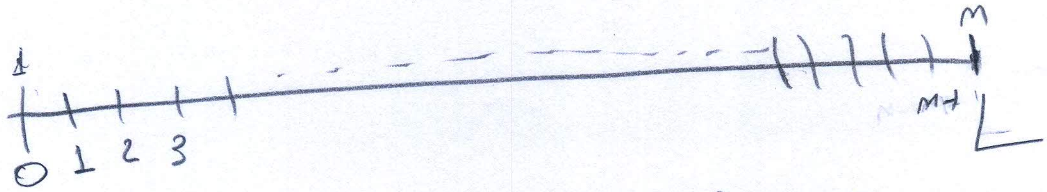
Vetor de infinitas dimensões.

Consideramos uma função da posição x (ou qualquer variável contínua)

$f(x)$ definida num intervalo $\boxed{0 \le x \le L}$

Imaginemos uma discretização do intervalo $\boxed{\Delta x \cdot (n) = L}$

eg:



Em cada valor discreto de x, f(x) tem um valor.

Então podemos definir o vetor

$$|f_n\rangle = \begin{pmatrix} f_n(x_1) \\ f_n(x_2) \\ \vdots \\ f_n(x_n) \end{pmatrix}$$

Vindo da discretização. $f_n(x_i)$ é a função no caso discretizado.

A posição (discretizada) é também um vetor dado pelo ket $|x_i\rangle$

$$|x_i\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow \text{fileira } i$$

os $\{|x_i\rangle\}$ são uma base ortonormal.

I.e.

$$\langle x_i | x_j \rangle = \delta_{ij}$$

Eles satisfazem (verificar!) a relação de completeza

$$\sum_{i=1}^{m} |x_i\rangle\langle x_i| = \mathbb{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

Nessa base podemos escrever $|f_m\rangle$ como

$$|f_m\rangle = \sum_{i=1}^{m} f_m(x_i)|x_i\rangle$$

$$\Rightarrow \langle x_i | f_m \rangle = f_m(x_i)$$

função em x_i é o resultado da projeção na base $\{|x_i\rangle\}$

Portanto, o produto interno é dado por

$$\langle f_n | g_n \rangle = \sum_{i=1}^{n} f_n^*(x_i)\, g_n(x_i)$$

onde temos duas funções $f(x)$ e $g(x)$ avaliadas no intervalo discretizado e expressadas na base $\{|x_i\rangle\}$.

As funções se dizem de ortogonais se $\langle f_n | g_n \rangle = 0$.

No limite $n \to \infty$ $(\Delta x \to 0)$, obtemos um vetor de dimensão infinita:

$$|f_n\rangle \xrightarrow[n \to \infty]{} |f\rangle$$

Para definir o produto interno nesse limite $(n \to \infty, \Delta x \to 0)$ escrevemos ele como

$$\langle f_n | g_n \rangle = \sum_{i=1}^{n} f_n^*(x_i)\, g_n(x_i)\, \Delta x$$

$$\Big\downarrow \begin{matrix} n \to \infty \\ \Delta \to 0 \end{matrix}$$

$$\boxed{\langle f | g \rangle = \int_0^L f^*(x)\, g(x)\, dx}$$

Base de vetores: $\{|x\rangle\}$

Sabemos que para dois pontos diferentes $x \neq x'$ os estados associados são ortogonais:

$$\langle x | x' \rangle = 0$$

Mas e se $x = x'$?

$$\langle x | x' \rangle = ?$$

Começando pela relação de completeza num intervalo $[a,b]$:

$$\int_a^b |x'\rangle\langle x'| \, dx = \mathbb{I}$$

$$\Rightarrow \int_a^b \langle x|x'\rangle\langle x'|f\rangle \, dx' = \langle x|\mathbb{I}|f\rangle = \langle x|f\rangle$$

$\Rightarrow$ Claramente

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$$

onde $\delta(x-x')$ é a função delta de Dirac.

Ela é definida por

$$\int_a^b \delta(x-x') f(x') \, dx' = f(x) \qquad \forall x \,/\, a \le x \le b$$

Em particular

$$\int_a^b \delta(x-x')\,dx' = 1 \quad \forall\, a \le x \le b$$

Integral representation of $\delta(x-x')$

A transformada de Fourier de uma função de variável x é

$$\tilde{f}(k) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x)\, dx$$

A transformada inversa resulta na função original

$$f(x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx'} \tilde{f}(k)\, dk$$

$$\Rightarrow \quad f(x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx'} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} f(x)\,dx \right) dk$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x'-x)}\, dk\, f(x)\, dx$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')}\,dk = \delta(x-x')$$

Derivada da delta de Dirac

$$\frac{d}{dx}\delta(x-x') = -\frac{d}{dx'}\delta(x-x') \equiv \delta'(x-x')$$

Ação dela é:

$$\int \delta'(x-x')f(x')\,dx' = \int \frac{d}{dx}\delta(x-x')f(x')\,dx'$$

$$= \frac{d}{dx}\int \delta(x-x')f(x')\,dx'$$

$$\Rightarrow \left[\int \delta'(x-x')f(x') = \frac{df(x)}{dx}\right]$$

$$\Rightarrow \boxed{\delta'(x-x') = \delta(x-x')\frac{d}{dx'}} \;?$$

Operadores em espaços de Dimensão Infinita

Consideremos um operador linear Ω atuando num vetor $|f\rangle$ no espaço (de Hilbert)

$$\Rightarrow \quad \Omega|f\rangle = |\tilde{f}\rangle$$

onde $\tilde{f}(x)$ é uma função resultado da ação do operador Ω no vetor definido por $f(x)$.
Um operador muito importante para nós e que faz isso é a derivada:

$$\tilde{f}(x) = \frac{d}{dx} f(x)$$

Então, na linguagem de operadores, podemos definir D tal que

$$D|f\rangle = \left|\frac{df}{dx}\right\rangle$$

$\downarrow$

ket correspondente à função $\frac{df}{dx}$

Queremos expressar D na base de autoestados $\{|x\rangle\}$ $\Rightarrow$ Projetar em $\langle x|$:

$$\Rightarrow \quad \langle x|D|f\rangle = \langle x|\frac{df}{dx}\rangle = \frac{d}{dx}f(x)$$

$\Rightarrow$ Na base $\{|x\rangle\}$ o elemento de matriz $\langle x|D|f\rangle$ (projeção de $|\frac{df}{dx}\rangle$ na base) é simplesmente a $\frac{d}{dx}$ aplicada em $f(x)$.

Se agora inserimos a identidade $\int |x'\rangle\langle x'| dx'$

$$\Rightarrow \quad \int \langle x|D|x'\rangle\langle x'|f\rangle \, dx' = \frac{df(x)}{dx}$$

$$\downarrow$$

$$\Rightarrow \quad \int \langle x|D|x'\rangle \, f(x') \, dx' = \frac{df(x)}{dx}$$

de onde podemos deduzir que

$$\langle x|D|x'\rangle = \delta(x-x')\frac{d}{dx'} = \delta'(x-x')$$

$\Rightarrow$ Elemento de matriz de D na base $\{|x\rangle\}$ $\boxed{D_{xx'} \equiv \langle x|D|x'\rangle = \delta'(x-x')}$

D não é hermitiano

Para ver isso,

$$(D_{xx'})^{\dagger} = D^{*}_{x'x} = \delta'(x'-x) = -\delta'(x-x') = -D_{xx'}$$

$\Rightarrow$ é anti-hermitiano.

Mas podemos construir um operador hermitiano baseado em D:

$$K \equiv -iD$$

$$K^{\dagger} = iD^{\dagger} = -iD = K \checkmark$$

Então, aparentemente, K é hermitiano. Porém, o fato do espaço ter dimensão infinita traz uma diferença:
Para que o operador K seja hermitiano, sabemos que ele precisa satisfazer

$$\langle g|K|f\rangle = \langle g|Kf\rangle = \langle Kf|g\rangle^{*} = \langle f|K^{\dagger}|g\rangle^{*}$$

$$\overset{K=K^{\dagger}}{=} \langle f|K|g\rangle^{*}$$

onde $f(x)$ e $g(x)$ são duas funções num intervalo $a \le x \le b$

Insertando a identidade (2 vezes!)

$$\int_a^b |x\rangle\langle x|\, dx = \mathbb{I}$$

é possível provar (lista) que a igualdade

$$\langle g|K|f\rangle = \langle f|K|g\rangle^*$$

é satisfeita para o operador K só se

$$-i\, g^*(x) f(x)\Big|_a^b = 0$$

i.e. $-i\, g^*(b) f(b) + i\, g^*(a) f(a) = 0$

$\Rightarrow$ para satisfazer a condição de <u>hermiticidade</u> precisamos de entender o comportamento das funções que definem o espaço de Hilbert nos extremos.

Por exemplo, se $a = -\infty$, $b = +\infty$ e $f(x), g(x), \ldots$ se anulam para $|x| \to \infty$ então a condição de contorno sempre é satisfeita.

Mais complexo é o caso de condições de contorno periódicos.

Autovalores do operador K

Definimos o ket $|k\rangle$ como um autovetor do operador K com autovalor k, i.e.

$$K\,|k\rangle = k\,|k\rangle$$

Projetando na base $\{|x\rangle\}$ multiplicamos por $\langle x|$

$$\langle x|K|k\rangle = k\,\langle x|k\rangle$$

Definimos

$$\psi_k(x) \equiv \langle x|k\rangle$$

a função (auto-função!) associada ao autovetor $|k\rangle$ projetado na base $\{|k\rangle\}$. Inserindo a identidade no lado esquerdo:

$$\int \langle x|K|x'\rangle\langle x'|k\rangle = k\,\psi_k(x)$$

$$\Rightarrow \quad \int \langle x|K|x'\rangle\,\psi_k(x') = k\,\psi_k(x)$$

Mas sabemos que

$$\langle x|K|x'\rangle = -i\,\delta'(x-x') = -i\,\delta(x-x')\frac{d}{dx'}$$

$$\Rightarrow \int -i\,\delta(x-x')\,\frac{d}{dx'}\psi_k(x') = k\,\psi_k(x)$$

$$\Rightarrow \boxed{-i\,\frac{d\psi_k(x)}{dx} = k\,\psi_k(x)}$$

A solução dessa equação diferencial é

$$\psi_k(x) = A\,e^{ikx} = \langle x|k\rangle$$

Onde a constante arbitrária A será escolhida para que os autovetores $|k\rangle$ sejam ortonormais.

$$\langle k|k'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle k|x\rangle\langle x|k'\rangle\,dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} A^* e^{-ikx} A\,e^{ik'x}\,dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k'-k)x}\,dx$$

$\Rightarrow$ se escolhemos $A = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}$

$$\Rightarrow \langle k|k'\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k'-k)x}\,dx = \delta(k-k')$$

$$\Rightarrow \langle x|k\rangle = \psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{ikx} \rightarrow \{|k\rangle\} \text{ ortonormal}$$

Dado K hermitiano → {autovalores k são reais; → $\{|k\rangle\}$ base ortonormal

Então, vetores $|f\rangle$ que na base $\{|x\rangle\}$ eram expandidos como

$$\langle x|f\rangle = f(x)$$

os funções $f(x)$, devem também ter uma expansão na base $\{|k\rangle\}$:

$$\langle k|f\rangle \equiv f(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle k|x\rangle\langle x|f\rangle\, dx$$

$$\Rightarrow \quad f(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} f(x)\, dx$$

⇒ $\boxed{f(k) \text{ é a transformada de Fourier de } f(x)}$

Para confirmar,

$$f(x) = \langle x|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|k\rangle\langle k|f\rangle\, dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} f(k)$$

Os elementos de matriz do op. K na base $\{|k\rangle\}$ são

$$\boxed{\langle k|K|k'\rangle = k'\,\delta(k-k')}$$

Os elementos de matriz do operador X na base $\{|x\rangle\}$ também são simples:

$$X|x\rangle = x|x\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\langle x'|X|x\rangle = x\,\delta(x-x')}$$

Como o X atúa em funções do espaço de Hilbert?

$$X|f\rangle \ ?$$

$$\langle x|X|f\rangle = \int \langle x|X|x'\rangle\langle x'|f\rangle\,dx'$$

$$= \int x'\,\delta(x-x')\,f(x')\,dx' = x\,f(x)$$

$$\Leftrightarrow \quad \boxed{X|f(x)\rangle = |x\,f(x)\rangle}$$

Operadores Conjugados

Agora vamos calcular os elementos de matriz do operador X na ~~base~~ $\{|k\rangle\}$

$$\langle k|X|k'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \langle k|x\rangle\langle x|X|x'\rangle\langle x'|k'\rangle \, dx\, dx'$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} \, x'\delta(x-x') \, \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik'x'} \, dx\, dx'$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k'-k)x} \, x \, dx$$

$\Rightarrow$ Podemos escrever como

$$\langle k|X|k'\rangle = i\frac{d}{dk}\underbrace{\left(\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x}\, dx\right)}_{\delta(k-k')}$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle k|X|k'\rangle = i\,\delta'(k-k')}$$

a ser comparada com

$$\left\{ \langle x|K|x'\rangle = -i\,\delta'(x-x') \right\} \text{ K na base } \{|x\rangle\} \text{ !}$$

Então, se $|g(k)\rangle$ é um ket na base $\{|k\rangle\}$ associado à função $g(k)$, temos que

$$\langle k|X|g(k)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle k|X|k'\rangle\langle k'|g(k)\rangle$$

$$= \int i\,\delta'(k-k')\,g(k')$$

$$= i\int \delta(k-k')\,\frac{dg(k')}{dk'}$$

$$\langle k|X|g(k)\rangle = i\,\frac{dg(k)}{dk}$$

$$\Rightarrow \boxed{X|g(k)\rangle = \left|\frac{i\,dg(k)}{dk}\right\rangle}$$

enquanto que

$$\boxed{K|f(x)\rangle = \left|-i\frac{df(x)}{dx}\right\rangle}$$

$\Rightarrow X, K$ operadores conjugados

Operadores Conjugados NÃO comutam ?

Ej: $\langle x | X | f \rangle = x f(x)$

$$\langle x | K | f \rangle = -i \frac{df(x)}{dx}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \langle x | X K | f \rangle = -i x \frac{df(x)}{dx} \\ \langle x | K X | f \rangle = -i \frac{d}{dx}(x f(x)) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \langle x | [X, K] | f \rangle = i \mathbb{I}$$

$$\Rightarrow \boxed{[X, K] = i}$$

O momento será $\boxed{P = \hbar K}$