Conceitos fundamentais

Prof. Emerson Passos

1. Espaço dos vetores de estado. Operadores lineares. Representação de vetores de estado e operadores.

2. Observáveis. Autovalores e autovetores de um observável. Medida na Mecânica Quântica. Postulados. Relações de incerteza. Mudança de base. Diagonalização. Observáveis com espectro contínuo. Posição e momento. Função de onda.

Espaço dos vetores de estado

- O estado do sistema é representado por um vetor num espaço vetorial complexo, munido de um produto escalar hermiteano. Vamos adotar a notação de Dirac:

<u>Vetor de estado</u> $|\alpha\rangle$ $\rightarrow$ "*ket*", α rótulo identificador.

- **Dimensionalidade:** é determinada pela natureza do sistema físico considerado.

- **Estrutura de espaço vetorial:** estão definidas as operações de soma de vetores e multiplicação de um vetor por um número complexo.

a) A soma de dois vetores $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ é um terceiro vetor $|\gamma\rangle$,

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle$$

que satisfaz as propriedades:

(a1) <u>Associativa</u>: $|\alpha\rangle + (|\beta\rangle + |\gamma\rangle) = (|\alpha\rangle + |\beta\rangle) + |\gamma\rangle$

(a2) <u>Comutativa</u>: $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle$

(a3) <u>Vetor Nulo</u> $|\otimes\rangle$: $|\alpha\rangle + |\otimes\rangle = |\alpha\rangle$ para qualquer $|\alpha\rangle$

(a4) <u>Vetor Inverso</u>: $|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle = |\otimes\rangle$ para todo $|\alpha\rangle$

b) O produto de um vetor $|\alpha\rangle$ por um número complexo c é o vetor $c|\alpha\rangle$ que satisfaz as propriedades:

(b1) <u>Associativa</u>: $(c_1 c_2)|\alpha\rangle = c_1(c_2|\alpha\rangle)$

(b2) <u>Distributiva</u>: $(c_1 + c_2)|\alpha\rangle = c_1|\alpha\rangle + c_2|\alpha\rangle$

$$c(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = c|\alpha\rangle + c|\beta\rangle$$

(b3) $1\,|\alpha\rangle = |\alpha\rangle$ para qualquer $|\alpha\rangle$

Um vetor de estado contém todas as informações sobre o estado físico do sistema.

- **Produto Escalar Hermiteano:** operação que associa a todo par de vetores |α> e |β> um número complexo que será indicado pelo símbolo (β,α), satisfazendo as propriedades:

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{(p1)}\ (\alpha,\beta+\gamma)=(\alpha,\beta)+(\alpha,\gamma) \\ \text{(p2)}\ (\alpha,c\beta)=c(\alpha,\beta) \\ \text{(p3)}\ (\alpha,\beta)=(\beta,\alpha)^{*} \\ \text{(p4)}\ (\alpha,\alpha)\ \text{é}\ \underline{\text{real}} \\ \qquad 0\le(\alpha,\alpha)<\infty \quad (\alpha,\alpha)=0 \Leftrightarrow |\alpha\rangle=|\otimes\rangle \end{array}}$$

<u>Consequência das propriedades</u>**:** Linearidade do produto escalar com respeito ao segundo argumento e antilinearidade com respeito ao primeiro argumento

$$\boxed{\begin{array}{l} (\alpha,c_1\beta+c_2\gamma)=c_1(\alpha,\beta)+c_2(\alpha,\gamma) \\ (c_1\beta+c_2\gamma,\alpha)=c_1^{*}(\beta,\alpha)+c_2^{*}(\gamma,\alpha) \end{array}}$$

<u>Ortogonalidade</u>**:** Dois vetores são ortogonais se $(\alpha,\beta)=0$

<u>Norma</u>**:** $\boxed{\left\| |\alpha\rangle \right\| = (\alpha,\alpha)^{1/2}}$

$$(\alpha,\alpha)=1 \rightarrow \text{vetor de estado } \underline{\text{normalizado}}$$

- Se o espaço dos vetores de estado tem dimensão ***N***, existe uma **base de vetores de estado** dada por *N* vetores ortonormais,

$$\left(\phi_i, \phi_j\right) = \delta_{ij} \qquad\qquad i, j = 1, \ldots, N$$

tal que qualquer vetor de estado pode ser escrito como:

$$\boxed{\left|\alpha\right\rangle = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \left|\phi_i\right\rangle \qquad\qquad \alpha_i = \left\langle \phi_i \middle| \alpha \right\rangle}$$

Espaço Dual. "*Bras*"

- Dado um espaço vetorial podemos definir funções lineares com valores complexos dos vetores do espaço, $\boxed{a\left(|\alpha\rangle\right)=\langle a|\alpha\rangle}$

<u>Linearidade</u>: $a\left(c_{\alpha}|\alpha\rangle+c_{\beta}|\beta\rangle\right)=c_{\alpha}\langle a|\alpha\rangle+c_{\beta}\langle a|\beta\rangle$

a) Soma de funções lineares

$$\boxed{\langle a|\alpha\rangle=\langle a_1|\alpha\rangle+\langle a_2|\alpha\rangle}$$

(a1) <u>Associativa</u>: $\langle a_1|\alpha\rangle+\left(\langle a_2|\alpha\rangle+\langle a_3|\alpha\rangle\right)=$
$\left(\langle a_1|\alpha\rangle+\langle a_2|\alpha\rangle\right)+\langle a_3|\alpha\rangle$

(a2) <u>Comutativa</u>: $\langle a_1|\alpha\rangle+\langle a_2|\alpha\rangle=\langle a_2|\alpha\rangle+\langle a_1|\alpha\rangle$

(a3) <u>Função Nula</u>: $\langle\otimes|\alpha\rangle=0$, para qualquer $|\alpha\rangle$

(a4) <u>Função Inversa</u>: $\langle a|\alpha\rangle+\langle -a|\alpha\rangle=\langle\otimes|\alpha\rangle$

b) Produto da função linear por um número complexo:

$$\boxed{\langle ca|\alpha\rangle=c\langle a|\alpha\rangle}$$

(b1) <u>Associativa</u>: $(c_1c_2)\langle a|\alpha\rangle=c_1\left(c_2\langle a|\alpha\rangle\right)$

(b2) <u>Distributiva</u>: $(c_1+c_2)\langle a|\alpha\rangle=c_1\langle a|\alpha\rangle+c_2\langle a|\alpha\rangle$
$c\left(\langle a_1|\alpha\rangle+\langle a_2|\alpha\rangle\right)=c\langle a_1|\alpha\rangle+c\langle a_2|\alpha\rangle$

(b3) $1\ \langle a|\alpha\rangle=\langle a|\alpha\rangle$

- <u>Estrutura de espaço vetorial</u>: **Espaço Dual do espaço de partida.**
- <u>Correspondência dual</u>: A cada vetor |α> associamos uma função linear <α| tal que o seu valor no vetor |β> seja $\boxed{\alpha\left(|\beta\rangle\right)=\langle\alpha|\beta\rangle=(\alpha,\beta)}$

- Na notação de Dirac, um vetor do espaço dual é chamado de "*bra*". Os produtos escalares entre dois vetores do espaço vetorial aparecem como *brackets*

$$\underbrace{\langle \alpha | \beta \rangle}_{\text{bra(c)}\textit{ket}}$$

- Correspondência entre vetores do espaço vetorial e do espaço dual é tal que

$$\boxed{\begin{array}{ccc} |\alpha\rangle & \xleftrightarrow{\text{DC}} & \langle\alpha| \\ c|\alpha\rangle & \xleftrightarrow{\text{DC}} & c^*\langle\alpha| \\ c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle & \xleftrightarrow{\text{DC}} & c_\alpha^*\langle\alpha| + c_\beta^*\langle\beta| \end{array}}$$

- Dada uma base no espaço vetorial podemos achar uma base correspondente no espaço dual: $\{|\phi_n\rangle\} \xleftrightarrow{\text{DC}} \{\langle\phi_n|\}$

$$|\alpha\rangle = \sum_n \alpha_n |\phi_n\rangle \xleftrightarrow{\text{DC}} \langle\alpha| = \sum_n \alpha_n^* \langle\phi_n|$$

tal que

$$\boxed{\langle\alpha|\beta\rangle = \sum_n \alpha_n^* \beta_n = (\alpha, \beta)}$$

Operadores Lineares

- Ação de um operador linear num vetor do espaço vetorial transforma esse vetor em outro vetor do mesmo espaço:

$$\boxed{|\beta\rangle = \hat{X}|\alpha\rangle}$$

<u>Linearidade</u>: $\hat{X}\left(c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle\right) = c_\alpha \hat{X}|\alpha\rangle + c_\beta \hat{X}|\beta\rangle$

a) Soma de operadores lineares

$$\boxed{\left(\hat{X}+\hat{Y}\right)|\alpha\rangle = \hat{X}|\alpha\rangle + \hat{Y}|\alpha\rangle}$$

(a1) <u>Comutativa</u>: $\hat{X}+\hat{Y} = \hat{Y}+\hat{X}$

(a2) <u>Associativa</u>: $\hat{X}+\left(\hat{Y}+\hat{Z}\right) = \left(\hat{X}+\hat{Y}\right)+\hat{Z} = \hat{X}+\hat{Y}+\hat{Z}$

b) Produto de operadores lineares

$$\boxed{\left(\hat{X}\hat{Y}\right)|\alpha\rangle = \hat{X}\left(\hat{Y}|\alpha\rangle\right)}$$

(b1) <u>Não-Comutativa (em geral)</u>: $\hat{X}\hat{Y} \neq \hat{Y}\hat{X}$

(b2) <u>Associativa</u>: $\hat{X}\left(\hat{Y}\hat{Z}\right) = \left(\hat{X}\hat{Y}\right)\hat{Z}$

- **Representação de vetores de estado e operadores numa dada base**:

$$\{|\phi_n\rangle, n = 1, 2, \ldots\}$$

1) Vetores de estado são representados em termos de suas componentes nessa base:

$$\boxed{|\alpha\rangle = \sum_n \alpha_n |\phi_n\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\alpha\rangle \qquad \alpha_n = \langle\phi_n|\alpha\rangle}$$

$\alpha_n = \langle\phi_n|\alpha\rangle \rightarrow$ elementos da matriz coluna que representa o vetor de estado $|\alpha\rangle$ na base $\{|\phi_n\rangle\}$.

2) Um operador linear é representado em termos de uma matriz determinada através da ação do operador em cada um dos vetores da base:

$$\boxed{\hat{X}|\phi_n\rangle = \sum_m |\phi_m\rangle X_{mn} = \sum_m |\phi_m\rangle\langle\phi_m|\hat{X}|\phi_n\rangle \qquad X_{mn} = \langle\phi_m|\hat{X}|\phi_n\rangle}$$

$X_{mn} = \langle\phi_m|\hat{X}|\phi_n\rangle \rightarrow$ elementos da matriz que representa o operador $\hat{X}$ na base $\{|\phi_n\rangle\}$.

- Dado um operador $\hat{X}$ definimos o **operador hermiteano conjugado**, $\hat{X}^{\dagger}$, através da relação

$$\boxed{\langle\alpha|\hat{X}^{\dagger}|\beta\rangle = \langle\beta|\hat{X}|\alpha\rangle^{*}}$$

<u>*Representação numa dada base*</u> → matriz complexa conjugada da transposta da matriz que representa $\hat{X}$,

$$\boxed{\left(X^{\dagger}\right)_{nm} = \langle\phi_n|\hat{X}^{\dagger}|\phi_m\rangle = \langle\phi_m|\hat{X}|\phi_n\rangle^{*} = X^{*}_{mn}}$$

<u>*Correspondência dual*</u> → $\hat{X}|\alpha\rangle \xleftrightarrow{\mathrm{DC}} \langle\alpha|\hat{X}^{\dagger}$

<u>*Propriedades*</u>

$$\boxed{\begin{array}{ll} \bullet\left(\hat{X}^{\dagger}\right)^{\dagger} = \hat{X} & \bullet\left(c\hat{X}\right)^{\dagger} = c^{*}\hat{X}^{\dagger} \\ \bullet\left(\hat{X}+\hat{Y}\right)^{\dagger} = \hat{X}^{\dagger}+\hat{Y}^{\dagger} & \bullet\left(\hat{X}\hat{Y}\right)^{\dagger} = \hat{Y}^{\dagger}\hat{X}^{\dagger} \end{array}}$$

- **Operador Hermiteano**: $\boxed{\hat{X} = \hat{X}^{\dagger}}$

  <u>*Representação numa dada base*</u> → $X_{nm} = X^{*}_{mn}$

- **Operador Anti-hermiteano**: $\boxed{\hat{X} = -\hat{X}^{\dagger}}$

Resolução da identidade

- **Operadores de projeção:** Seja $|\chi\rangle$ um vetor de estado normalizado, $\langle\chi|\chi\rangle = 1$.

  Definimos o operador: $\boxed{\hat{P}_\chi \equiv |\chi\rangle\langle\chi|}$

<u>Propriedades</u>

a) <u>Hermiteano</u>: $\hat{P}_\chi^\dagger = \hat{P}_\chi$

b) <u>Idempotente</u>: $\hat{P}_\chi^2 = \hat{P}_\chi$

$\boxed{\hat{Q}_\chi = \hat{1} - \hat{P}_\chi}$ $\rightarrow$ operador de projeção complementar à $\hat{P}_\chi$

$\hat{P}_\chi + \hat{Q}_\chi = \hat{1}$ $\quad\quad$ $\hat{P}_\chi \hat{Q}_\chi = \hat{Q}_\chi \hat{P}_\chi = 0$

Todo vetor de estado pode ser decomposto na soma de dois vetores ortogonais da forma:

$$\boxed{|\alpha\rangle = \hat{P}_\chi |\alpha\rangle + \hat{Q}_\chi |\alpha\rangle}$$

- Se $|\chi\rangle$ é tomado igual à um dos vetores de uma base ortonormal $|\phi_n\rangle$:

$$\hat{P}_{\phi_n}|\alpha\rangle = |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\alpha\rangle$$

Em particular a expansão:

$$|\alpha\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\alpha\rangle = \sum_n \hat{P}_{\phi_n}|\alpha\rangle \quad \Rightarrow \quad \boxed{\sum_n \hat{P}_{\phi_n} = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \hat{1}}$$

relação de completeza

- Vamos exemplificar como os operadores introduzidos e a notação de Dirac facilitam os cálculos na MQ:

i) Expansão de um vetor de estado $|\alpha\rangle$ em termos de suas componentes na base $|\phi_n\rangle$:

$$|\alpha\rangle = \left(\sum_n \hat{P}_{\phi_n}\right)|\alpha\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\alpha\rangle$$

ii) Representação de um operador linear $\hat{X}$ na base $|\phi_n\rangle$:

$$\hat{X} = \left(\sum_n \hat{P}_{\phi_n}\right)\hat{X}\left(\sum_m \hat{P}_{\phi_m}\right) = \sum_{n,m}|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\hat{X}|\phi_m\rangle\langle\phi_m| = \sum_{n,m} X_{nm}|\phi_n\rangle\langle\phi_m|$$

Mudança de Base

- Duas bases distintas no espaço de vetores de estado: $\{\,|\phi_i\rangle\,\} \leftrightarrow \{\,|\psi_i\rangle\,\}$

$$\boxed{|\psi_i\rangle = \hat{U}|\phi_i\rangle} \qquad \hat{U} \rightarrow \text{operador unitário} \quad \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{1}$$

$$\boxed{|\psi_i\rangle = \sum_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|\hat{U}|\phi_i\rangle = \sum_j |\phi_j\rangle U_{ji}}$$

$$U_{ji} = \langle\phi_j|\hat{U}|\phi_i\rangle \rightarrow \underline{\text{matriz unitária}} \text{ que representa } \hat{U} \text{ na base } \{|\phi_i\rangle\}$$

- Dado um *"ket"* qualquer, como se relacionam os coeficientes da sua expansão nas duas bases?

$$|\alpha\rangle = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|\alpha\rangle \qquad |\alpha\rangle = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\alpha\rangle$$

$$\boxed{\langle\psi_i|\alpha\rangle = \sum_j U^*_{ji}\langle\phi_j|\alpha\rangle \quad \Leftrightarrow \quad \alpha^{(\psi)} = U^\dagger\alpha^{(\phi)}}$$

$$\alpha^{(\psi)} \rightarrow \text{matriz coluna que representa o vetor } |\alpha\rangle \text{ na base } \{|\psi_i\rangle\}$$

$$\alpha^{(\phi)} \rightarrow \text{matriz coluna que representa o vetor } |\alpha\rangle \text{ na base } \{|\phi_i\rangle\}$$

- Qual a relação entre as matrizes que representam um operador nas duas bases?

$$\hat{X} = \sum_{i,j} |\phi_i\rangle\langle\phi_i|\hat{X}|\phi_j\rangle\langle\phi_j| \qquad \hat{X} = \sum_{i,j} |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\hat{X}|\psi_j\rangle\langle\psi_j|$$

$$\boxed{\langle\psi_i|\hat{X}|\psi_j\rangle = \sum_{k,l} U_{ki}^{*}\langle\phi_k|\hat{X}|\phi_l\rangle U_{lj}}$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{X^{(\psi)} = U^{\dagger} X^{(\phi)} U}$$

$X^{(\psi)} \rightarrow$ matriz que representa o operador $\hat{X}$ na base $\{|\psi_i\rangle\}$,

$X^{(\phi)} \rightarrow$ matriz que representa o operador $\hat{X}$ na base $\{|\phi_i\rangle\}$,

$U \rightarrow$ matriz unitária que relaciona os vetores da base $\{|\psi_i\rangle\}$ com os vetores da base $\{|\phi_i\rangle\}$.

Observáveis. Autovetores e autovalores de um observável.

Equação de autovalores para um operador $\hat{G}$:

$$\hat{G}|g\rangle = g|g\rangle.$$

O número, em geral complexo, g é o autovalor e $|g\rangle$ o autovetor.

Correspondência: Variáveis dinâmicas clássicas $\rightarrow$ operadores hermiteanos

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \qquad \hat{A}^{\dagger} = \hat{A}.$$

Propriedades da equação de autovalores para operadores hermiteanos:

1. Autovalores são reais;
2. Autovetores com diferentes autovalores são ortogonais;
3. Autovetores de um operador hermiteano definem uma base no espaço de vetores de estado.

- **Caso não-degenerado:** Existe apenas um autovetor para um dado autovalor. Relação biunívoca entre o autovalor e o correspondente autovetor.

  Rótulo identificador, o autovalor:

$$\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij} \qquad |\alpha\rangle = \sum_{a_i} |a_i\rangle\langle a_i|\alpha\rangle.$$

- **Caso degenerado:** Quando existe mais de um autovetor com o mesmo autovalor. Se o operador é hermiteano pode-se mostrar que se d_i é a ordem de degenerescência existem d_i autovetores linearmente independentes que podem ser ortogonalizados. Entretanto nesse caso não existe uma relação biunívoca entre o autovalor e o correspondente autovetor.

  No subespaço degenerado a equação de autovalores fica igual a

$$\hat{A}|a_i, k\rangle = a_i|a_i, k\rangle \qquad k = 1, \ldots, d_i,$$

  onde k é um rótulo que seleciona um vetor de estado no subespaço degenerado

$$\langle a_i, k|a_j, l\rangle = \delta_{ij}\delta_{kl} \qquad |\alpha\rangle = \sum_{a_i, k=1}^{d_i} |a_i, k\rangle\langle a_i, k|\alpha\rangle.$$

Medidas na MQ: Postulados

Postulado 1 *O resultado da medida de um observável $\hat{A}$ é sempre um dos seus autovalores.*

Postulado 2 *Se o sistema está no estado $|\alpha\rangle$, a probabilidade de se obter o valor a_i numa medida de $\hat{A}$ é*

$$p(a_i, \alpha) = |\langle a_i|\alpha\rangle|^2,$$

se $|\alpha\rangle$ é um estado normalizado, $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$.

Postulado 3 (Redução do "pacote de onda") *Se numa medida do observável $\hat{A}$ acharmos o valor a_i, o sistema muda de um modo abrupto para o auto-estado de $\hat{A}$ com esse autovalor.*

- A probabilidade é sempre não-negativa e a soma das probabilidades de se medir todos os autovalores de um observável é igual a um;

$$p(a_i, \alpha) = \left| \langle a_i | \alpha \rangle \right|^2$$

$$\sum_i p(a_i, \alpha) = \sum_i \langle \alpha | a_i \rangle \langle a_i | \alpha \rangle = \langle \alpha | \alpha \rangle = 1$$

- Valor médio das medidas de um observável se o sistema está no estado $|\alpha\rangle$:

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle_\alpha = \sum_i a_i \, p(a_i, \alpha) = \sum_i \langle \alpha | a_i \rangle a_i \langle a_i | \alpha \rangle$$

Então:

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle_\alpha = \langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle$$

- Generalização quando existe degenerescência:

Caso não-degenerado

$$p(a_i, \alpha) = \langle \alpha | \hat{P}_{a_i} | \alpha \rangle = \left| \frac{\langle \alpha | \hat{P}_{a_i} | \alpha \rangle}{\langle \alpha | \hat{P}_{a_i} | \alpha \rangle^{1/2}} \right|^2$$

$$\hat{P}_{a_i} = | a_i \rangle \langle a_i | \rightarrow \text{ projetor no estado } | a_i \rangle$$

Caso degenerado

Calculamos as probabilidades como mostrado acima, onde agora $\hat{P}_{a_i}$ é o projetor no subespaço degenerado de autovalor a_i :

$$\boxed{\hat{P}_{a_i} = \sum_{k=1}^{d_i} |a_i, k\rangle\langle a_i, k|}$$

Probabilidade de numa medida do observável $\hat{A}$ de acharmos o valor a_i :

$$\boxed{p(a_i, \alpha) = \langle \alpha | \hat{P}_{a_i} | \alpha \rangle = \sum_{k=1}^{d_i} \left| \langle a_i, k | \alpha \rangle \right|^2}$$

$$|\alpha\rangle \longrightarrow \boxed{\begin{array}{l} \textit{Medida} \\ \quad \textit{de } \hat{A} = a_i \end{array}} \begin{array}{l} \longrightarrow |a_i\rangle \text{ se não existe degenerescência} \\ \longrightarrow \dfrac{\hat{P}_{a_i}}{\langle\alpha|\hat{P}_{a_i}|\alpha\rangle^{1/2}}|\alpha\rangle \text{ se existe degenerescência} \end{array}$$

Observáveis compatíveis. Conjunto completo de observáveis compatíveis. Como determinar uma base do espaço de vetores de estado?

- **Observáveis compatíveis:** Dois observáveis são *compatíveis* se $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

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

Propriedades

a) **Espectro de $\hat{A}$ não-degenerado:** Suponha que $\hat{A}$ e $\hat{B}$ são observáveis compatíveis e o espectro de $\hat{A}$ não-degenerado. Então autovetores de $\hat{A}$ são autovetores de $\hat{B}$ com autovalores $\langle a_i|\hat{B}|a_i\rangle$.

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle \qquad \hat{B}|a_i\rangle = \langle a_i|\hat{B}|a_i\rangle|a_i\rangle$$

Vetores da base $\{|a_i\rangle\}$ autovetores simultâneos dos observáveis compatíveis $\hat{A}$ e $\hat{B}$.

b) **Espectro de $\hat{A}$ degenerado:** De $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ segue que

$$(a_i - a_j)\langle a_i, k|\hat{B}|a_j, l\rangle = 0.$$

Elementos de matriz não-nulos somente para os autoestados com o mesmo autovalor de $\hat{A}$.

Podemos achar autovetores de $\hat{B}$ em cada subespaço degenerado:

$$\hat{B}|a_i, b_l\rangle = b_l|a_i, b_l\rangle$$
$$\hat{A}|a_i, b_l\rangle = a_i|a_i, b_l\rangle$$

$$|a_i, b_l\rangle = \sum_{j=1}^{d_i} c_j^{(l)} |a_i, j\rangle$$

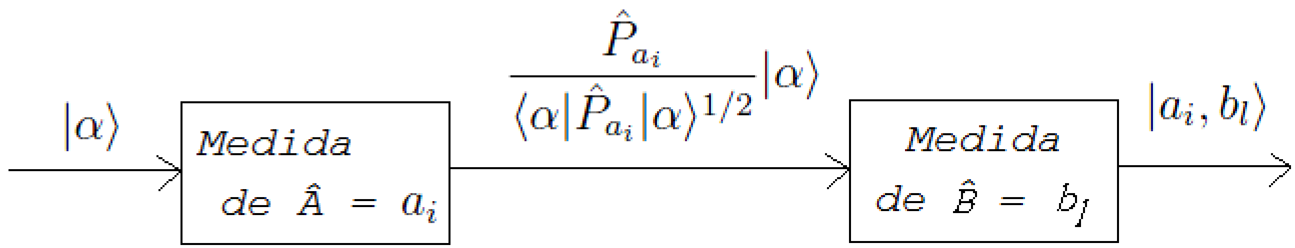
Vetores da base $\{|a_i, b_l\rangle\}$ autovetores simultâneos dos observáveis compatíveis $\hat{A}$ e $\hat{B}$.

Duas possibilidades:

1. Dado um par de autovalores de $\hat{A}$ e $\hat{B}$ existe apenas um autovetor simultâneo de $\hat{A}$ e $\hat{B}$ com esse par de autovalores. Nesse caso podemos rotular os estados da base pelos pares de autovalores, $|a_i, b_l\rangle$, e os observáveis compatíveis $\hat{A}$ e $\hat{B}$ são um **conjunto completo de observáveis compatíveis**.
2. Quando a multiplicidade permanece devemos achar uma série de observáveis compatíveis entre si, $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \ldots$ tal que dado o conjunto de autovalores desses observáveis existe apenas um autovetor simultâneo de $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \ldots$ com esse conjunto de autovalores. Nesse caso, os observáveis compatíveis $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \ldots$ são um **conjunto completo de observáveis compatíveis**.

- **Como determinar uma base no espaço de vetores de estado?**

$\hat{A}$ e $\hat{B}$ observáveis compatíveis



Selecionamos os vetores da base fazendo medidas simultâneas dos observáveis $\hat{A}$ e $\hat{B}$.

Probabilidade de nas medidas sucessivas acima acharmos os valores a_i , b_l :

$$\text{Prob} = \left| \frac{\langle a_i, b_l | \hat{P}_{a_i} | \alpha \rangle}{\langle \alpha | \hat{P}_{a_i} | \alpha \rangle^{1/2}} \right|^2 \langle \alpha | \hat{P}_{a_i} | \alpha \rangle = \left| \langle a_i, b_l | \hat{P}_{a_i} | \alpha \rangle \right|^2 = \left| \langle a_i, b_l | \alpha \rangle \right|^2$$

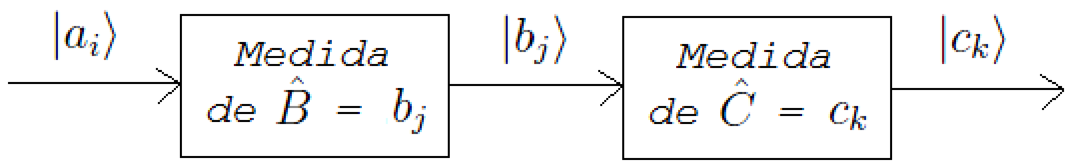
Observáveis incompatíveis

$$\boxed{\text{Se } [\hat{A}, \hat{B}] \neq 0, \text{ então } \hat{A} \text{ e } \hat{B} \text{ são observáveis } \textit{incompatíveis}.}$$

Não existe mais uma base cujos vetores sejam autovetores simultâneos dos observáveis incompatíveis $\hat{A}$ e $\hat{B}$.

Medidas de observáveis incompatíveis

Sejam $\hat{A}$, $\hat{B}$, $\hat{C}$ três observáveis incompatíveis. Considere a sequência de medidas mostrada abaixo:



1. Qual é a probabilidade de numa medida de $\hat{B}$ acharmos o valor b_j e numa posterior medida de $\hat{C}$ acharmos o valor c_k?

   Essa probabilidade é

$$\boxed{P_{a_i \to b_j \to c_k} = |\langle c_k | b_j \rangle|^2 |\langle b_j | a_i \rangle|^2.}$$

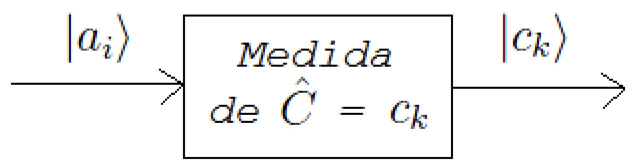
   Medida interpretada como um processo de filtragem que seleciona apenas o estado $|b_j\rangle$ numa medida de $\hat{B}$.

2. Agora considere uma sequência de medidas como no caso anterior, a diferença sendo que medimos o observável $\hat{B}$ sem selecionar o vetor de estado.

   Nesse caso a probabilidade é:

$$\boxed{P_{a_i \to B \to c_k} = \sum_{b_j} |\langle c_k|b_j\rangle|^2 |\langle b_j|a_i\rangle|^2.}$$

3. Vamos comparar o processo onde medimos $\hat{B}$ sem selecionar com o processo onde não fazemos a medida de $\hat{B}$.



   Nesse caso a probabilidade é igual a

$$\boxed{P_{a_i \to c_k} = |\langle c_k|a_i\rangle|^2}$$

Para entender a diferença entre medir sem selecionar e não medir. Note que:

$$\begin{aligned}
P_{a_i\to b_j\to c_k} &= |\langle c_k|b_j\rangle|^2|\langle b_j|a_i\rangle|^2 = |\mathcal{A}_{a_i\to b_j\to c_k}|^2 \\
P_{a_i\to B\to c_k} &= \sum_{b_j}|\langle c_k|b_j\rangle|^2|\langle b_j|a_i\rangle|^2 = \sum_{b_j}|\mathcal{A}_{a_i\to b_j\to c_k}|^2 \\
P_{a_i\to c_k} &= |\langle c_k|a_i\rangle|^2 = \left|\sum_{b_j}\mathcal{A}_{a_i\to b_j\to c_k}\right|^2
\end{aligned}$$

onde $\mathcal{A}_{a_i\to b_j\to c_k} = \langle c_k|b_j\rangle\langle b_j|a_i\rangle$ é a amplitude de probabilidade da partícula inicialmente no estado $|a_i\rangle$ mudar para o estado $|c_k\rangle$ através do estado intermediário $|b_j\rangle$. A transição através de um dado $|b_j\rangle$ define um caminho.

No caso 1 o filtro de Stern-Gerlach que mede $\hat{B}$ seleciona apenas o estado $|b_j\rangle$. Consequentemente só existe um caminho e a probabilidade é o módulo ao quadrado da amplitude de probabilidade da partícula percorrer esse caminho.

No caso 2 quando medimos $\hat{B}$ sem selecionar identificamos o caminho percorrido pela partícula e a probabilidade é igual a soma das probabilidades da partícula percorrer os diversos caminhos.

Quando não medimos o observável $\hat{B}$ não sabemos que caminho a partícula percorreu e a probabilidade é igual ao módulo ao quadrado da amplitude total dada pela soma das amplitudes de probabilidade da partícula percorrer os diversos caminhos.

$$P_{a_i \to c_k} = \sum_j |\mathcal{A}_{a_i \to b_j \to c_k}|^2 + \sum_{j \neq l} \mathcal{A}_{a_i \to b_j \to c_k} \mathcal{A}^\star_{a_i \to b_l \to c_k}.$$

A diferença entre elas está no termo de interferência entre amplitudes de probabilidades da partícula se encontrar em caminhos diferentes.

Isto não quer dizer que a partícula está simultaneamente em dois caminhos diferentes pois nesse caso não podemos associar a partícula um caminho. Entretanto se identificamos o caminho esse termo de interferência desaparece, e 3 se reduz a 2.

- **Diagonalização. Solução da equação de autovalores para um operador hermiteano.**

A equação de autovalores para o operador hermiteano $\hat{B}$ é

$$\hat{B}|b'\rangle = b'|b'\rangle.$$

Se conhecemos a ação de $\hat{B}$ numa base,

$$\hat{B}|a_i\rangle = \sum_j |a_j\rangle\langle a_j|\hat{B}|a_i\rangle$$

e se escrevemos o autovetor $|b'\rangle$ como uma combinação linear dos estados da base $\{|a_i\rangle\}$,

$$|b'\rangle = \sum_i c_i|a_i\rangle, \qquad c_i = \langle a_i|b'\rangle,$$

a equação de autovalores pode ser escrita como

$$B'c' = b'c'$$

onde c' é uma matriz coluna cujas componentes são os coeficientes da expansão do autovetor na base $\{|a_i\rangle\}$ e B' é a matriz hermiteana que representa $\hat{B}$ nessa base.

Reduzimos o problema de achar os autovalores e autovetores de um operador hermiteano ao problema de achar os autovalores e autovetores de uma matriz hermiteana que é a representação de $\hat{B}$ numa dada base.

Autovalores da matriz são os autovalores do operador e os autovetores da matriz são as matrizes colunas que representam os autovetores na base de partida.

1. Cálculo dos autovalores

   Autovalores da matriz B são determinadas pela equação característica

   $$\boxed{\det(B - b') = 0.}$$

   Se a dimensão da matriz B é N, esta equação é uma equação algébrica de grau N em b' e ela possui N raízes reais incluindo a multiplicidade (degenerescência).

2. Cálculo dos autovetores

   Para cada autovalor b'_l resolvemos o sistema de N equações lineares homogêneas para os coeficientes $c_i'^{(l)}$, com condição de normalização

   $$\boxed{\langle b'_l | b'_l \rangle = \sum_i |c_i'^{(l)}|^2 = 1.}$$

Existem duas bases: a base de partida $\{|a_i\rangle\}$ e a base de autovetores de $\hat{B}$, $\{|b_j\rangle\}$.

Existe um operador unitário que transforma a base de partida $\{|a_i\rangle\}$ na base de autovetores de $\hat{B}$, $\{|b_j\rangle\}$:

$$|b_i\rangle = \hat{U}|a_i\rangle = \sum_j |a_j\rangle U_{ji} \qquad U_{ji} = \langle a_j|\hat{U}|a_i\rangle = c_j^{(i)}.$$

Representação de $\hat{B}$ na base de seus autovetores e na base de partida estão relacionadas pela transformação unitária

$$B' = U^\dagger B U.$$

A matriz que representa $\hat{B}$ na base de seus autovetores, B', é uma matriz diagonal, cujos elementos da diagonal são os autovalores de B, dizemos então que B é diagonalizada pela transformação unitária U.

Relações de incerteza

Dispersão das medidas de um observável $\hat{A}$, se o sistema está no estado $|O\rangle$

- Definição:

$$\sigma_A^2 = \sum_i \left(a_i - \langle \hat{A} \rangle_O\right)^2 p(a_i, O) = \sum_i a_i^2 p(a_i, O) - \left(\sum_i a_i p(a_i, O)\right)^2$$

- Expressão da dispersão (variância, desvio quadrático médio)

$$\sigma_A^2 = \langle O|\hat{A}^2|O\rangle - \langle O|\hat{A}|O\rangle^2 = \langle O|(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_O)^2|O\rangle$$

- Dispersão nula se e somente se,

$$(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_O)|O\rangle = 0$$

isto é, se o estado do sistema for um autovetor de $\hat{A}$.

Princípio da incerteza

$\hat{A}$ e $\hat{B}$ dois observáveis incompatíveis. Nesse caso vale a desigualdade:

$$\boxed{\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \frac{1}{4} |\langle O | [\hat{A}, \hat{B}] | O \rangle|^2}$$

Demonstração baseada em três propriedades:

1. Desigualdade de Schwarz
$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2$$
   Igualdade se e somente se $|\alpha\rangle + \lambda |\beta\rangle = 0$.

2. Valor médio de um operador hermiteano é um número real.

3. Valor médio de um operador anti-hermiteano é um número imaginário puro.

Prova:

$$|\alpha\rangle = (\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle_O)|O\rangle = \hat{A}_D|O\rangle$$

$$|\beta\rangle = (\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle_O)|O\rangle = \hat{B}_D|O\rangle$$

$\hat{A}_D$ e $\hat{B}_D$ são operadores hermiteanos.

De 1. temos que

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq |\langle O|\hat{A}_D\hat{B}_D|O\rangle|^2.$$

Expressão para o produto de dois operadores

$$\hat{A}_D\hat{B}_D = \frac{1}{2}[\hat{A}_D, \hat{B}_D] + \frac{1}{2}\{\hat{A}_D, \hat{B}_D\}$$

onde

$$[\hat{A}_D, \hat{B}_D] = \hat{A}_D\hat{B}_D - \hat{B}_D\hat{A}_D, \quad \text{comutador}$$

$$\{\hat{A}_D, \hat{B}_D\} = \hat{A}_D\hat{B}_D + \hat{B}_D\hat{A}_D, \quad \text{anti-comutador}$$

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \frac{1}{4}\left(|\langle O|[\hat{A}_D,\hat{B}_D]|O\rangle|^2 + |\langle O|\{\hat{A}_D,\hat{B}_D\}|O\rangle|^2\right)$$

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \frac{1}{4}|\langle O|[\hat{A},\hat{B}]|O\rangle|^2$$

Em geral o princípio da incerteza depende do estado do sistema, $|O\rangle$.
Igualdade ocorre estados que satisfazem as relações:

1. $(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle_O)|O\rangle = -\lambda(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle_O)|O\rangle$
2. $\langle O|\left\{(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle_O),(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle_O)\right\}|O\rangle = 0$

Valor médio anti-comutador nulo $\rightarrow \lambda + \lambda^\star = 0$ e $\lambda = \frac{\langle O|[\hat{A},\hat{B}]|O\rangle}{2\sigma_B^2}$
Estado de incerteza mínima

$$(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle_O)|O\rangle = -\lambda(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle_O)|O\rangle$$

com λ imaginário puro determinado acima.

Observáveis com um espectro contínuo

- Até agora consideramos observáveis cujo espectro é discreto.
- Existem observáveis com espectro contínuo. Exemplos: operador posição, operador momento.
- Formulação da Mecânica Quântica em espaços vetoriais de dimensão infinita e não-enumerável não-trivial.

  No curso, vamos proceder em analogia com o caso discreto.

  Seja $\hat{\xi}$ um observável cujo espectro é contínuo e $|\xi'\rangle$ um auto-estado de $\hat{\xi}$ com autovalor ξ':

  $$\hat{\xi}|\xi'\rangle = \xi'|\xi'\rangle$$

  onde os autovetores $|\xi'\rangle$ são uma base contínua no espaço de vetores de estado.

  Observação: Numa formulação rigorosa, um observável cujo espectro é contínuo não tem auto-estados pois não são normalizáveis. Entretanto, tendo em mente essa observação vamos continuar chamando os estados $|\xi'\rangle$ de auto-estados do observável $\hat{\xi}$.

Em analogia com o caso discreto temos:

1. Ortogonalidade

$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij} \longrightarrow \langle \xi' | \xi'' \rangle = \delta(\xi' - \xi'')$$

2. Completeza

$$\sum_i |a_i\rangle\langle a_i| = 1 \longrightarrow \int d\xi' |\xi'\rangle\langle\xi'| = 1$$

3. Expansão de um vetor de estado $|\alpha\rangle$, em termos de vetores de uma dada base

$$|\alpha\rangle = \sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\alpha\rangle \longrightarrow |\alpha\rangle = \int d\xi' |\xi'\rangle\langle\xi'|\alpha\rangle$$

4. Expressão do produto escalar em termos das componentes dos vetores numa dada base

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \sum_i \langle a_i|\beta\rangle^\star \langle a_i|\alpha\rangle \longrightarrow \langle\beta|\alpha\rangle = \int d\xi' \langle\xi'|\beta\rangle^\star \langle\xi'|\alpha\rangle$$

5. Cálculo de $\langle\alpha|\hat{X}|\beta\rangle$

$$\langle\alpha|\hat{X}|\beta\rangle = \sum_{ij} \langle a_i|\alpha\rangle^\star \langle a_i|\hat{X}|a_j\rangle\langle a_j|\beta\rangle \longrightarrow \langle\alpha|\hat{X}|\beta\rangle = \int d\xi' d\xi'' \langle\xi'|\alpha\rangle^\star \langle\xi'|\hat{X}|\xi''\rangle\langle\xi''|\beta\rangle$$

$$\langle\xi'|\hat{X}|\xi''\rangle : \text{ representação do operador } \hat{X} \text{ na base } \{|\xi'\rangle\}$$

Operador posição

Caso unidimensional

- "Auto-estados" do operador posição: $\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle$

- Expansão de um vetor genérico na base dos "auto-estados" do operador posição:

$$|\alpha\rangle = \int dx |x\rangle\langle x|\alpha\rangle, \qquad \langle x|\alpha\rangle \text{ a função de onda do estado } |\alpha\rangle$$

- **Medida da posição:** Uma medida da posição localiza a partícula num intervalo Δ em torno do ponto x',

  Probabilidade de achar a partícula entre os pontos $x' - \Delta/2$ e $x' + \Delta/2$, se $|\alpha\rangle$ é o estado da partícula

$$\text{Prob}\left(x' - \frac{\Delta}{2} < x < x' + \frac{\Delta}{2}\right) = \int_{x'-\frac{\Delta}{2}}^{x'+\frac{\Delta}{2}} |\langle x|\alpha\rangle|^2 dx = |\langle\alpha_L|\alpha\rangle|^2$$

  A medida da posição corta uma fatia de largura Δ em torno do ponto x' da função de onda do estado $|\alpha\rangle$:

$$|\alpha_L\rangle = \int_{x'-\frac{\Delta}{2}}^{x'+\frac{\Delta}{2}} |x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle$$

Função de onda do estado localizado $|\alpha_L\rangle$:

$$\langle x|\alpha_L\rangle = \begin{cases} \langle x|\alpha\rangle & \text{se } x' - \frac{\Delta}{2} \leq x \leq x' + \frac{\Delta}{2} \\ 0 & \text{nos outros casos} \end{cases}$$

O estado localizado pode ser expresso como:

$$|\alpha_L\rangle = P\left(x' - \frac{\Delta}{2} < x < x' + \frac{\Delta}{2}\right)|\alpha\rangle,$$

onde $P\left(x' - \frac{\Delta}{2} < x < x' + \frac{\Delta}{2}\right) = \int_{x'-\frac{\Delta}{2}}^{x'+\frac{\Delta}{2}} dx''|x''\rangle\langle x''|$ é o operador de projeção que localiza a partícula no intervalo $x' - \frac{\Delta}{2} < x < x' + \frac{\Delta}{2}$.

Interpretação da medida da posição:

$|\alpha\rangle = \int dx'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle$	$\frac{1}{\langle\alpha_L|\alpha_L\rangle^{1/2}}|\alpha_L\rangle$

Estado antes da medida $\rightarrow$ Estado após a medida

Probabilidade de achar a partícula no intervalo acima:

$$\text{Prob}\left(x' - \frac{\Delta}{2} < x < x' + \frac{\Delta}{2}\right) = |\langle\alpha_L|\alpha\rangle|^2 = \langle\alpha|P\left(x' - \frac{\Delta}{2} < x < x' + \frac{\Delta}{2}\right)|\alpha\rangle$$

$$= \int_{x'-\frac{\Delta}{2}}^{x'+\frac{\Delta}{2}} |\langle x''|\alpha\rangle|^2 dx''$$

- **Densidade de probabilidade:** No limite quando Δ tende a zero a probabilidade fica proporcional a Δ, a constante de proporcionalidade é a densidade de probabilidade no ponto x', $\rho(x')$. Da expressão da probabilidade extraímos que

$$\rho(x') = |\langle x'|\alpha\rangle|^2.$$

Generalização para três dimensões

- Operador posição, operador vetorial,

$$\hat{\mathbf{x}} = \hat{x}\mathbf{e}_x + \hat{y}\mathbf{e}_y + \hat{z}\mathbf{e}_z = \sum_{i=1}^{3} \hat{x}_i \mathbf{e}_i \qquad \hat{x}_1 \to \hat{x} \quad \hat{x}_2 \to \hat{y} \quad \hat{x}_3 \to \hat{z}$$

  cujas componentes comutam, $[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0$.

- Observáveis compatíveis, autovetores simultâneos:

$$\hat{x}_i |\mathbf{x}'\rangle = x_i |\mathbf{x}'\rangle \quad \text{onde} \quad |\mathbf{x}'\rangle \equiv |x', y', z'\rangle.$$

- Todas as propriedades dos observáveis com espectro contínuo são naturalmente válidas, exemplos:

  1. *Normalização:*

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{x}'' \rangle = \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') = \delta(x' - x'')\delta(y' - y'')\delta(z' - z'')$$

  2. *Completeza:*

$$|\alpha\rangle = \int d\mathbf{x}' |\mathbf{x}'\rangle\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle, \qquad \langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle \text{ a função de onda do estado } |\alpha\rangle$$

Translação. Operador momento – 3D.

- Translação $\rightarrow$ deslocamento espacial numa dada direção.

  $\hat{T}(d\mathbf{a})$ o operador que translada de $d\mathbf{a}$ os vetores de estado, $d\mathbf{a} = da\mathbf{n}$, um deslocamento infinitesimal.

  Propriedades geométricas da translação

$$|\langle \mathbf{x}|\hat{T}(d\mathbf{a})|\alpha\rangle|^2 = |\langle \mathbf{x} - d\mathbf{a}|\alpha\rangle|^2$$

  Probabilidade de achar a partícula no ponto $\mathbf{x}$ no estado transladado igual a probabilidade de achar a partícula no ponto $\mathbf{x} - d\mathbf{a}$ no estado inicial.

  Escolha de fase $\rightarrow$ igualdade das amplitudes:

$$\langle \mathbf{x}|\hat{T}(d\mathbf{a})|\alpha\rangle = \langle \mathbf{x} - d\mathbf{a}|\alpha\rangle \qquad \hat{T}(d\mathbf{a})|\alpha\rangle \rightarrow \text{ estado transladado}$$

- Propriedades do operador de translação infinitesimal

  1. O estado transladado é normalizado se o estado $|\alpha\rangle$ é normalizado,

$$\langle \alpha|\hat{T}^\dagger(d\mathbf{a})\hat{T}(d\mathbf{a})|\alpha\rangle = 1.$$

$$\hat{T}^\dagger(d\mathbf{a})\hat{T}(d\mathbf{a}) = \hat{T}(d\mathbf{a})\hat{T}^\dagger(d\mathbf{a}) = 1 \qquad \hat{T}(d\mathbf{a}) \rightarrow \text{ operador unitário}$$

  2. Translações infinitesimais são comutativas e aditivas.

$$\hat{T}(d\mathbf{a}')\hat{T}(d\mathbf{a}) = \hat{T}(d\mathbf{a})\hat{T}(d\mathbf{a}') = \hat{T}(d\mathbf{a} + d\mathbf{a}').$$

3. Existe a translação infinitesimal inversa:

$$\hat{T}(-d\mathbf{a})\hat{T}(d\mathbf{a}) = \hat{1} \Rightarrow \hat{T}(-d\mathbf{a}) = \hat{T}^{\dagger}(d\mathbf{a}) = \hat{T}^{-1}(d\mathbf{a}).$$

Mecânica Clássica: gerador das translações $\rightarrow$ momento do sistema.

Mecânica Quântica: gerador das translações $\rightarrow$ operador momento, $\hat{\mathbf{p}}$.

- $\hat{\mathbf{p}}$, operador momento, operador vetorial, hermiteano,

$$\hat{T}(d\mathbf{a}) = 1 - i d\mathbf{a} \cdot \frac{\hat{\mathbf{p}}}{\hbar}.$$

Pelo fato do momento ser um operador hermiteano, as propriedades 1., 2. e 3. automaticamente satisfeitas.

- Relações de comutação entre o operador posição e o operador momento:

$$\langle \mathbf{x}'|\hat{\mathbf{x}}\hat{T}(d\mathbf{a})|\alpha\rangle = \mathbf{x}'\langle \mathbf{x}' - d\mathbf{a}|\alpha\rangle \quad \langle \mathbf{x}'|\hat{T}(d\mathbf{a})\hat{\mathbf{x}}|\alpha\rangle = (\mathbf{x}' - d\mathbf{a})\langle \mathbf{x}' - d\mathbf{a}|\alpha\rangle.$$

Por consequência,

$$\langle \mathbf{x}'|[\hat{\mathbf{x}}, \hat{T}(d\mathbf{a})]|\alpha\rangle = d\mathbf{a}\langle \mathbf{x}' - d\mathbf{a}|\alpha\rangle.$$

Até 1ª ordem em $d\mathbf{a}$:

$$[\hat{\mathbf{x}}, \hat{T}(d\mathbf{a})] = d\mathbf{a}.$$

Usando a expressão de $\hat{T}(d\mathbf{a})$ acima:

$$[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}.$$

Translação finita

- Translação de $\mathbf{a}$ na direção $\mathbf{n}$, $a = Nda$.

$$\hat{T}(\mathbf{a}) = \lim_{N\to\infty}\left(1 - ida\frac{\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{p}}}{\hbar}\right)^N = \lim_{N\to\infty}\left(1 - \frac{i}{N}\frac{\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{p}}}{\hbar}\right)^N \quad\Rightarrow\quad \hat{T}(\mathbf{a}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)$$

1. $\hat{T}(\mathbf{a})$ é um operador unitário, $\hat{T}^\dagger(\mathbf{a})\hat{T}(\mathbf{a}) = \hat{1}$.
2. Translações finitas são comutativas e aditivas.

$$\hat{T}(\mathbf{a}_1)\hat{T}(\mathbf{a}_2) = \hat{T}(\mathbf{a}_2)\hat{T}(\mathbf{a}_1) = \hat{T}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2).$$

3. Consequência das translações finitas serem comutativas:

$$\hat{T}_x(\epsilon)\hat{T}_y(\epsilon) - \hat{T}_y(\epsilon)\hat{T}_x(\epsilon) = 0 = -\frac{\epsilon^2}{\hbar^2}[\hat{p}_x, \hat{p}_y] \Rightarrow [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0.$$

De um modo análogo mostra-se que: $[\hat{p}_y, \hat{p}_z] = 0$ e $[\hat{p}_z, \hat{p}_x] = 0$.
As componentes do operador momento são observáveis compatíveis, consequência direta do fato das translações espaciais serem comutativas.

- Relações de comutação fundamentais (canônicas)

$$[\hat{x}_j, \hat{x}_k] = 0 \to \text{translações do momento comutativas}$$

$$[\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0 \to \text{translações espaciais comutativas}$$

$$[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}$$

- Componentes do operador momento = operadores compatíveis. Desse modo, existe uma base de autovetores simultâneos desses observáveis:

$$\hat{p}_k|\mathbf{p}'\rangle = p'_k|\mathbf{p}'\rangle \quad k = 1, 2, 3$$
$$|\mathbf{p}'\rangle = |p'_x, p'_y, p'_z\rangle.$$

- Operador momento tem espectro contínuo. Autovetores satisfazem as propriedades de um observável com espectro contínuo.

  Por simplicidade, caso unidimensional

Função de onda no espaço das posições e no espaço dos momentos

- Função de onda no espaço das posições

$$|\alpha\rangle = \int dx'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle,$$

  onde $\langle x'|\alpha\rangle = \psi_\alpha(x)$ é a função de onda do estado $|\alpha\rangle$.

  Significado físico: $|\langle x'|\alpha\rangle|^2$ densidade de probabilidade da partícula se encontrar no ponto x'.

  Propriedades:

  1. Produto escalar de dois vetores de estado:

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \int dx'\langle\beta|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \int dx'\psi^\star_\beta(x')\psi_\alpha(x').$$

2. Completeza das autofunções de um observável:

$$\langle x'|\alpha\rangle = \sum_i \langle x'|a_i\rangle\langle a_i|\alpha\rangle \Rightarrow \psi_\alpha(x') = \sum_i \psi_{a_i}(x')\langle a_i|\alpha\rangle.$$

3. Elementos de matriz de um operador:

$$\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle = \int dx'dx''\psi^\star_\alpha(x')\langle x'|\hat{A}|x''\rangle\psi^\star_\beta(x')$$

$\langle x'|\hat{A}|x''\rangle$: representação do operador $\hat{A}$ no espaço das posições.

Ação do operador momento no espaço das posições:

$$\langle x'|\hat{T}(da)|\alpha\rangle = \langle x' - da|\alpha\rangle$$

$$\langle x'|\alpha\rangle - \frac{i}{\hbar}da\langle x'|\hat{p}|\alpha\rangle = \langle x'|\alpha\rangle - da\frac{d}{dx'}\langle x'|\alpha\rangle$$

$$\langle x'|\hat{p}|\alpha\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx'}\langle x'|\alpha\rangle.$$

Ação do operador momento $= -i\hbar$ derivada da função de onda do vetor de estado.

Representação do operador momento no espaço das posições:

$$\langle x'|\hat{p}|\alpha\rangle = \int dx''\langle x'|\hat{p}|x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx'}\langle x'|\alpha\rangle.$$

Da relação acima deduzimos que:

$$\langle x'|\hat{p}|x''\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx'}\delta(x' - x'').$$

- Função de onda no espaço dos momentos:

Auto-estados do operador momento satisfazem as equações

$$\hat{p}|p'\rangle = p'|p'\rangle \quad \langle p'|p''\rangle = \delta(p' - p'').$$

Análogo ao operador posição,um vetor de estado pode ser expresso em termos de $|p'\rangle$:

$$|\alpha\rangle = \int dp'|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle,$$

onde $\phi_\alpha(p') = \langle p'|\alpha\rangle$ é a função de onda do estado $|\alpha\rangle$ no espaço dos momentos.

Relação entre as funções de onda no espaço das posições e no espaço dos momentos:

$$\langle p'|\alpha\rangle = \int dx' \langle p'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \qquad \phi_\alpha(p') = \int dx' \langle p'|x'\rangle \psi_\alpha(x')$$

e

$$\langle x'|\alpha\rangle = \int dp' \langle x'|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle \qquad \psi_\alpha(x') = \int dp' \langle x'|p'\rangle \phi_\alpha(p').$$

Análogo ao caso discreto. $\langle x'|p'\rangle$ é a função de transformação da função de onda no espaço das posições para a função de onda no espaço dos momentos ($\langle\psi_i|\alpha\rangle = \sum_j \langle\psi_i|\phi_j\rangle\langle\phi_j|\alpha\rangle$ onde $\langle\phi_j|\psi_i\rangle = U_{ji}$). Seu significado: função de onda do auto-estado de $\hat{p}$ com autovalor p'.

Equação de autovalores para $\hat{p}$:

$$\hat{p}|p'\rangle = p'|p'\rangle.$$

Da ação do operador $\hat{p}$ no espaço das posições temos:

$$-i\hbar\frac{d}{dx'}\langle x'|p'\rangle = p'\langle x'|p'\rangle.$$

Solução de normalização $\langle p'|p''\rangle = \delta(p'-p'')$, ondas planas:

$$\langle x'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}p'x'\right).$$

Conclusão: Funções de onda dos espaços dos momentos e das posições relacionadas por uma *transformada de Fourier*.

Generalização para três dimensões

- Caso unidimensional facilmente generalizado para três dimensões.
- Autovetores dos operadores posição e momento dados respectivamente por

$$\hat{\mathbf{x}}|\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{x}'|\mathbf{x}'\rangle \qquad \hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}'\rangle = \mathbf{p}'|\mathbf{p}'\rangle$$

normalizados como $\langle\mathbf{x}'|\mathbf{x}''\rangle = \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'')$ e $\langle\mathbf{p}'|\mathbf{p}''\rangle = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}'')$.

- Expansão de um vetor genérico $|\alpha\rangle$:

$$|\alpha\rangle = \int d\mathbf{x}'|\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle \qquad |\alpha\rangle = \int d\mathbf{p}'|\mathbf{p}'\rangle\langle\mathbf{p}'|\alpha\rangle$$

onde $\psi_\alpha(\mathbf{x}') = \langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle$ e $\phi_\alpha(\mathbf{p}') = \langle\mathbf{p}'|\alpha\rangle$ são, respectivamente, as funções de onda do estado $|\alpha\rangle$ no espaço das posições e no espaço dos momentos.

- Ação de $\hat{\mathbf{p}}$ no espaço das posições $= -i\hbar\nabla$:

$$\langle\mathbf{x}'|\hat{\mathbf{p}}|\alpha\rangle = -i\hbar\nabla'\psi_\alpha(\mathbf{x}').$$

- Ação de $\hat{\mathbf{x}}$ no espaço das posições = multiplicação por $\mathbf{x}$:

$$\langle\mathbf{x}'|\hat{\mathbf{x}}|\alpha\rangle = \mathbf{x}'\psi_\alpha(\mathbf{x}').$$

- Função de transformação no caso tridimensional:

$$\langle \mathbf{x}'|\mathbf{p}'\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}'\right).$$

- Relação das funções de onda nos dois espaços:

$$\phi_\alpha(\mathbf{p}') = \int d\mathbf{x}'\langle \mathbf{p}'|\mathbf{x}'\rangle\psi_\alpha(\mathbf{x}')$$

e

$$\psi_\alpha(\mathbf{x}') = \int d\mathbf{p}'\langle \mathbf{x}'|\mathbf{p}'\rangle\phi_\alpha(\mathbf{p}').$$