(21/10/21)

II.E. Dois exemplos importantes de representações e observáveis

II.E.1. As representações $\{|\vec{r}\rangle\}$ e $\{|\vec{p}\rangle\}$

Sejam as bases $\{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\}$ e $\{v_{\vec{p}_0}(\vec{r})\}$ de $\mathcal{F}$ dadas por:

$$\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta(\vec{r}-\vec{r}_0) \xrightarrow{\text{Ket associado}} |\vec{r}_0\rangle \xrightarrow{\text{índices contínuos}} x_0, y_0, z_0$$

$$v_{\vec{p}_0}(\vec{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_0\cdot\vec{r}} \longrightarrow |\vec{p}_0\rangle \longrightarrow p_x^0, p_y^0, p_z^0$$

Qualquer função de quadrado integrável e suficientemente regular pode ser expressa em uma dessas bases, embora as funções das bases em si não sejam quadrado integráveis.

Relações de ortonormalização e completeza

$$\langle\vec{r}_0|\vec{r}_0'\rangle = \int d^3\vec{r}\, \xi^*_{\vec{r}_0}(\vec{r})\, \xi_{\vec{r}_0'}(\vec{r}) = \delta(\vec{r}_0-\vec{r}_0')$$

$$\int d^3r_0\, |\vec{r}_0\rangle\langle\vec{r}_0| = \mathbb{1}$$

$$\langle\vec{p}_0|\vec{p}_0'\rangle = \int d^3\vec{r}\, v^*_{\vec{p}_0}(\vec{r})\, v_{\vec{p}_0'}(\vec{r}) = \delta(\vec{p}_0-\vec{p}_0')$$

$$\int d^3p_0\, |\vec{p}_0\rangle\langle\vec{p}_0| = \mathbb{1}$$

Componente de um ket

(21/10/11)

Podemos escrever:

$$|\psi\rangle = \int d^3r_0 \, |\vec{r_0}\rangle\langle\vec{r_0}|\psi\rangle$$

ou

$$|\psi\rangle = \int d^3p_0 \, |\vec{p_0}\rangle\langle\vec{p_0}|\psi\rangle$$

Os coeficientes $\langle\vec{r_0}|\psi\rangle$ e $\langle\vec{p_0}|\psi\rangle$:

$$\langle\vec{r_0}|\psi\rangle = \int d^3r \, \xi^*_{\vec{r_0}}(\vec{r})\,\psi(\vec{r}) = \int d^3r \, \delta(\vec{r}-\vec{r_0})\,\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r_0})$$

$$\langle\vec{p_0}|\psi\rangle = \int d^3r \, v^*_{\vec{p_0}}(\vec{r})\,\psi(\vec{r}) = \int d^3r \, (2\pi\hbar)^{3/2} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p_0}\cdot\vec{r}}\,\psi(\vec{r}) =$$

$$= \overline{\psi}(\vec{p_0})$$

Para exercícios 08 e 09

onde $\psi(\vec{r})$ e $\psi(\vec{p})$ são as transformadas de Fourier uma da outra.

Ex: Se $|\psi\rangle = |p_0\rangle$, temos:

$$\langle\vec{r_0}|\vec{p_0}\rangle = v_{\vec{p_0}}(\vec{r_0}) = \int d^3r \, \delta(\vec{r}-\vec{r_0})\,(2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p_0}\cdot\vec{r}} = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p_0}\cdot\vec{r_0}}$$

Tendo interpretado $\psi(\vec{r})$ e sua transformada de Fourier $\overline{\psi}(\vec{p})$ podemos escrever:

$$\langle\vec{r}|\psi\rangle = \psi(\vec{r})$$
$$\langle\vec{p}|\psi\rangle = \overline{\psi}(\vec{p})$$

e as relações de ortogonalidade e completeza:

$$\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \qquad \int d^3r\, |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}| = \mathbb{1}$$

$$\langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \qquad \int d^3p\, |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| = \mathbb{1}$$

Produto escalar de dois vetores

Podemos escrever:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int d^3r \langle \varphi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \psi \rangle = \int d^3r\, \varphi^*(\vec{r})\, \psi(\vec{r})$$

ou, na representação $\{|\vec{p}\rangle\}$:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int d^3p \langle \varphi | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \psi \rangle = \int d^3p\, \bar{\varphi}^*(\vec{p})\, \bar{\psi}(\vec{p})$$

Mudança de representação $\{|\vec{r}\rangle\}$ para $\{|\vec{p}\rangle\}$

Podemos obter as transformadas de Fourier $\psi(\vec{r})$ e $\bar{\psi}(\vec{p})$ usando mudança de representação:

Sabemos que:

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle^* = \int d^3r_0\, (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}_0}\, \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$$

Ou seja: $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle^* = (2\pi\hbar)^{-3/2}\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$

Assim: $\langle \vec{r}|\psi\rangle = \int d^3p \, \langle \vec{r}|\vec{p}\rangle\langle \vec{p}|\psi\rangle$

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3p \, (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \, \bar{\psi}(\vec{p})$$

ou, inversamente:

$$\langle \vec{p}, \psi\rangle = \int d^3r \, \langle \vec{p}|\vec{r}\rangle\langle \vec{r}|\psi\rangle$$

$$\bar{\psi}(\vec{p}) = \int d^3p \, (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \, \psi(\vec{r})$$

II.E.2. Operadores $\vec{R}$ e $\vec{P}$

Define-se o operador X tal que:

$$|\psi'\rangle = X|\psi\rangle \quad e \quad \psi'(x,y,z) = x\,\psi(x,y,z)$$

ou seja, o operador X coincide com o operador que multiplica a função $\psi(\vec{r})$ por x. Assim:

$$\langle \varphi|X|\psi\rangle = \int d^3r \, \langle \varphi|\vec{r}\rangle\langle \vec{r}|X|\psi\rangle = \int d^3r \, \varphi^*(\vec{r}) \, x \, \psi(\vec{r})$$

Podemos definir também:

$$\left.\begin{aligned} \langle \vec{r}|X|\psi\rangle &= x\langle \vec{r}|\psi\rangle \\ \langle \vec{r}|Y|\psi\rangle &= y\langle \vec{r}|\psi\rangle \\ \langle \vec{r}|Z|\psi\rangle &= z\langle \vec{r}|\psi\rangle \end{aligned}\right\} \quad \langle \vec{r}|\vec{R}|\psi\rangle = \vec{r}\langle \vec{r}|\psi\rangle$$

Similarmente, definimos o operador $\vec{P}$ por suas componentes P_x, P_y e P_z cuja ação na representação $\{|\vec{p}\rangle\}$ é dada por:

$$\langle \vec{p} | P_x | \psi \rangle = p_x \langle \vec{p} | \psi \rangle$$

$$\langle \vec{p} | P_y | \psi \rangle = p_y \langle \vec{p} | \psi \rangle$$

$$\langle \vec{p} | P_z | \psi \rangle = p_z \langle \vec{p} | \psi \rangle$$

Como o operador $\vec{P}$ atua na representação $\{|\vec{r}\rangle\}$?

$$\langle \vec{r} | P_x | \psi \rangle = \int d^3p \, \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | P_x | \psi \rangle = \int d^3p \, (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \, p_x \, \overline{\psi}(\vec{p}) =$$

$$= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r})$$ (equação (38.a) do Apêndice I)

Verificação:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \int d^3p \, (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \, \overline{\psi}(\vec{p}) =$$

$$= \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{i}{\hbar} \int d^3p \, (2\pi\hbar)^{-3/2} p_x \, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \, \overline{\psi}(\vec{p}) = \langle \vec{r} | P_x | \psi \rangle$$

Considerando outras componentes temos:

$$\langle \vec{r} | \vec{P} | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

Cálculo do elemento de matriz

21/10/11

Elemento de matriz de P_x na representação $\{|\vec{r}\rangle\}$:

$$\langle \varphi | P_x | \psi \rangle = \int d^3r \, \langle \varphi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | P_x | \psi \rangle = \int d^3r \, \varphi^*(\vec{r}) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r})$$

Exemplo: Cálculo dos comutadores entre operadores $X, Y, Z, P_x,$ P_y e P_z

$$\langle \vec{r} | [X, P_x] | \psi \rangle = \langle \vec{r} | X P_x | \psi \rangle - \langle \vec{r} | P_x X | \psi \rangle =$$

$$= x \langle \vec{r} | P_x | \psi \rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle \vec{r} | X | \psi \rangle =$$

$$= x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle \vec{r} | \psi \rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x \langle \vec{r} | \psi \rangle =$$

$$= x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle \vec{r} | \psi \rangle - \frac{\hbar}{i} \langle \vec{r} | \psi \rangle - \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial}{\partial x} \langle \vec{r} | \psi \rangle =$$

$$= \frac{-\hbar}{i} \langle \vec{r} | \psi \rangle = i\hbar \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

Assim: $[X, P_x] = i\hbar$

Da mesma maneira podemos encontrar:

$$\left.\begin{array}{l} [\vec{R}_i, \vec{R}_j] = 0 \\ [\vec{P}_i, \vec{P}_j] = 0 \end{array}\right\} \quad [\vec{R}_i, \vec{P}_j] = i\hbar \, \delta_{ij}$$

Que são chamadas de "relações de comutação canônicas".

$\vec{R}$ e $\vec{P}$ são hermitianos:

tilibra

$$\langle\varphi|X|\psi\rangle = \int d^3r\, \varphi^*(\vec{r})\,\psi(\vec{r}) = \left[\int d^3r\, \psi^*(\vec{r})\,\varphi(\vec{r})\right]^* = \langle\psi|X|\varphi\rangle^*$$

Lembrando que:

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle^* = \langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle$$

Vemos que X é hermitiano. Também:

$$X|\vec{r}\rangle = x|\vec{r}\rangle \qquad P_x|\vec{p}\rangle = p_x|\vec{p}\rangle$$
$$Y|\vec{r}\rangle = y|\vec{r}\rangle \qquad P_y|\vec{p}\rangle = p_y|\vec{p}\rangle$$
$$Z|\vec{r}\rangle = z|\vec{r}\rangle \qquad P_z|\vec{p}\rangle = p_z|\vec{p}\rangle$$

Ou seja, os kets $|\vec{r}\rangle$ são auto-vetores dos operadores X, Y e Z com autovalores x, y e z, respectivamente.
Analogamente para $|\vec{p}\rangle$ com relação a P_x, P_y e P_z.
Como $|\vec{r}\rangle$ e $|\vec{p}\rangle$ são bases então $\vec{R}$ e $\vec{P}$ são observáveis.
Além disso, como os autovalores x, y e z (p_x, p_y e p_z) de $\vec{R}$ ($\vec{P}$) determinam inequivocamente um vetor $|\vec{r}\rangle$ ($|\vec{p}\rangle$) da base, temos que $\vec{R}$ ($\vec{P}$) forma um C.S.C.O. em $\mathcal{E}_{\vec{r}}$.