Observáveis que Comutam

Teorema III: $\begin{cases} \text{Se duas observáveis } A \text{ e } B \text{ comutam, podemos construir uma base} \\ \text{ortonormal comum do espaço de estados, autokets de } A \text{ e } B, \text{ com} \\ \text{autovalores } a \text{ de A e } b \text{ de } B. \end{cases}$

Demonstração:

Como A é uma observável, temos $A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle \begin{cases} n=1,2... \\ i=1...g_n \end{cases}$ e $\langle u_n^i|u_{n'}^{i'}\rangle = \delta_{nn'}\delta_{ii'}$

A matriz que representa A é diagonal. Como seria a matriz que representa B na base $\{|u_n^i\rangle\}$? Sabemos (teorema II) que $\langle u_n^i|B|u_{n'}^{i'}\rangle = 0$ se $n \neq n'$, mas em princípio, não sabemos o que acontece quando $n = n'$ e $i \neq i'$. Que tal?

$$\begin{array}{cc} & \overbrace{|u_1^1\rangle \; |u_1^2\rangle}^{\mathcal{E}_1} \; \overbrace{|u_2\rangle}^{\mathcal{E}_2} \; \overbrace{|u_3\rangle}^{\mathcal{E}_3} \\ \begin{array}{c} \langle u_1^1| \\ \langle u_1^2| \\ \langle u_2| \\ \langle u_3| \\ \vdots \end{array} A = & \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & a_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & a_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & a_3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \end{array} \qquad \begin{array}{cc} & \overbrace{|u_1^1\rangle \; |u_1^2\rangle}^{\mathcal{E}_1} \; \overbrace{|u_2\rangle}^{\mathcal{E}_2} \; \overbrace{|u_3\rangle}^{\mathcal{E}_3} \\ B = & \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & 0 & 0 & \dots \\ B_{21} & B_{22} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & b_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & b_3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \end{array}$$

Observáveis que Comutam

Demonstração (continuação):

Primeiro, um outro exemplo: um espaço de cinco dimensões com o espectro de A dividido entre um valor bi-degenerado e outro tri-degenerado. Neste caso teríamos

$$
\begin{array}{c}
\\ \\
\langle u_1^1| \\ \langle u_1^2| \\ \langle u_2^1| \\ \langle u_2^2| \\ \langle u_2^3|
\end{array}
\;
\begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ A = \\ \\ \\ \end{array}
\begin{array}{c}
\overbrace{|u_1^1\rangle \quad |u_1^2\rangle}^{\mathcal{E}_1} \quad \overbrace{|u_2^1\rangle \quad |u_2^2\rangle \quad |u_2^2\rangle}^{\mathcal{E}_2} \\
\begin{pmatrix}
a_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & a_1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & a_2 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & a_2 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & a_2
\end{pmatrix}
\end{array}
\qquad
\begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ B = \\ \\ \\ \end{array}
\begin{array}{c}
\overbrace{|u_1^1\rangle \quad |u_1^2\rangle}^{\mathcal{E}_1} \quad \overbrace{|u_2^1\rangle \quad |u_2^2\rangle \quad |u_2^2\rangle}^{\mathcal{E}_2} \\
\begin{pmatrix}
B_{11} & B_{12} & 0 & 0 & 0 \\
B_{21} & B_{22} & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & B_{33} & B_{34} & B_{35} \\
0 & 0 & B_{43} & B_{44} & B_{45} \\
0 & 0 & B_{53} & B_{54} & B_{55}
\end{pmatrix}
\end{array}
$$

Observe a estrutura bloco-diagonal de B. Se diagonalizássemos B, os blocos misturariam? Nesta nova base, o operador A deixaria de ser diagonal?

A resposta é negativa para ambas as perguntas. De um modo geral, a matriz B, em uma base que diagonaliza A, é bloco diagonal e isso permite separar em

dois casos
- (1) a_n é não-degenerado, $g_n = 1 \;\therefore\; |u_n\rangle$ é um autovetor comum a A e B.
- (2) a_n é degenerado (degenerescência g_n). O bloco que representa B, em geral, não é diagonal.

Observáveis que Comutam

Demonstração (continuação):

Já sabemos que se, $|u_n\rangle \in \mathcal{E}_n \Rightarrow B|u_n\rangle \in \mathcal{E}_n$ (globalmente invariante com respeito à ação de B) e que $\beta_{ij}^{(n)} = \langle u_n^i|B|u_n^j\rangle,$ com $\beta_{ji}^{(n)\star} = \beta_{ij}^{(n)}$.

Como os blocos não se misturam no processo diagonalização, ache novos kets

$$|v_n^i\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} c_i|u_n^i\rangle,$$

para cada bloco, tal que $\langle v_n^i|B|v_n^j\rangle = \beta_i^{(n)}\delta_{ij}$ seja diagonal, isto é

$$B|v_n^i\rangle = \beta_i^{(n)}|v_n^i\rangle.$$

Como a base original era completa (autokets do operador Hermiteano A) e a nova é apenas uma "rotação" nos subespaços $\mathcal{E}_n,$ a nova base também é completa e $\therefore$ diagonaliza, simultaneamente, A e $B,$ dois operadores Hermiteanos que comutam.

Comentários

- Daqui para frente $\begin{cases} A|u_{n,p}^i\rangle = a_n|u_{n,p}^i\rangle \\ \\ B|u_{n,p}^i\rangle = b_p|u_{n,p}^i\rangle \end{cases}$ com $\begin{cases} i \rightarrow \text{degenerescência do par} \\ n \rightarrow a_n \text{ autovalor de } A \\ p \rightarrow b_p \text{ autovalor de } B \end{cases}$

Observáveis que Comutam

Comentários (continuação)

- O reverso do teorema III: Se existir uma base de autovetores comuns a A e B, estas duas observáveis comutam. Para ver isso, note que

$$AB|u^i_{n,p}\rangle = b_p A|u^i_{n,p}\rangle = b_p a_n |u^i_{n,p}\rangle,$$
$$BA|u^i_{n,p}\rangle = a_n B|u^i_{n,p}\rangle = a_n b_p |u^i_{n,p}\rangle,$$

e subtraia estas equações para obter

$$(AB - BA)|u^i_{n,p}\rangle = 0 \longrightarrow [A,B]|u^i_{n,p}\rangle = 0 \therefore [A,B] = 0$$

- $C = A + B$ com $[A,B] = 0$
  Aplique C em um elemento da base que diagonaliza simultaneamente A, e B, e obtenha

$$C|u^i_{n,p}\rangle = (A+B)|u^i_{n,p}\rangle = (a_n + b_p)|u^i_{n,p}\rangle$$

Assim, como $\{|u^i_{n,p}\rangle\}$ é uma base completa, todos os autovalores de C são do tipo $a_n + b_p$.

- Estamos prontos para definir um conceito bastante útil, diretamente ligado à processos de medidas: *Conjuntos Completos de Observáveis que Comutam.*

Conjunto Completo de Observáveis que Comutam (CCOC)

- Se $A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle$ e a_n é não-degenerado, cada a_n corresponde à um único ket $|u_n^i\rangle$ e ela (A) representa por si só um CCOC.

- Se $A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle$ e a_n é degenerado, cada a_n corresponde à g_n kets com este autovalor. Nestas condições, escolhemos uma outra observável $B,$ com $[A,B]=0,$ e construímos uma base ortonormal de autovetores comuns a A e B. Por definição, A e $B,$ forma uma conjunto completo de observáveis que comutam se, para cada par a_n e b_p existir apenas um vetor (a menos de um fator de fase). Isto exige que o par $\{a_n, b_p\}$ seja não degenerado. Isso ocorre se em $\mathcal{E}_n,$ subespaços onde a_n é degenerado, os autovalores de B não sejam degenerados, isto é $B|u_{n,p}^i\rangle = b_p|u_{n,p}^i\rangle,$ e b_p não é degenerado para um dado n (mesmo que dizer que os b_p são diferentes dentro de $\mathcal{E}_n$).

- Se para um par $\{a_n, b_p\}$ existem kets não colineares (mais de um), o conjunto $\{A, B\}$ não forma um CCOC.

- Encontre $C,$ tal que $[A,C]=0$ e $[B,C]=0$. Note que C será bloco diagonal. Os blocos de C são definidos pelos kets do subespaço $\mathcal{E}_{n,p}$.

Conjunto Completo de Observáveis que Comutam (CCOC)

- Os kets do subespaço $\mathcal{E}_{n,p}$ são autovetores $|u^i_{n,p}\rangle$ que possuem simultaneamente autovalores a_n e b_p degenerados.
- C é Hermiteano e globalmente invariante dentro do subespaço $\mathcal{E}_{n,p}$. Diagonalize C dentro deste subespaço.
- Se especificando a trinca $\{a_n, b_p, c_r\}$ todos os vetores estão unicamente definidos (a menos de uma fase global), então $\{A, B, C\}$ formam um CCOC.
- Se não, ache D que comute com $A, B,$ e C...

Resumindo

- *O conjunto* $\{A, B, C, ...\}$ *é dito CCOC, se:*
    - todas as observáveis comutam aos pares, $[A, B] = [A, C] = [B, C] = ... = 0$.
    - ao especificar os autovalores de todos os operadores determina-se de forma única (a menos de um fator de fase) os autovetores.
- O que equivale dizer: $\{A, B, C, ...\}$ é um CCOC, se existir uma única base ortonormal comum a elas.

Conjunto Completo de Observáveis que Comutam (CCOC)

- Ainda sobre CCOC - comentários
  - Se $\{A, B\}$ é um CCOC, $\{A, B, C\}$ também é um CCOC. Em geral ficamos com o mínimo.
  - Se $\{A, B, C, ...\}$ é um CCOC, uma boa notação para o ket seria: $|a_n, b_p, c_r, ...\rangle$
  - Para um dado sistema físico, existem vários CCOC's, como veremos a seguir.

- **Dois exemplos importantes de representações e de observáveis.**
  - Esses exemplos têm conexão direta com o espaço $\mathfrak{F}$ de funções. Lembre que

$$\forall\ \psi(\vec{r})\ \in\ \mathfrak{F} \Longrightarrow \exists\ \ |\psi\rangle\ \in\ \mathcal{E}_{\vec{r}},$$

  - Com isso, construímos $\mathcal{E}_{\vec{r}}$: um espaço de estados de uma partícula (sem spin).
  - Para cada função de onda de Schrödinger de $\mathfrak{F}$, associamos um ket estado $|\psi\rangle$ de $\mathcal{E}_{\vec{r}}$.
  - Preservamos a relação entre espaços $\langle\varphi|\psi\rangle = \displaystyle\int d^3r\ \varphi^\star(\vec{r})\psi(\vec{r})$.

Representação das coordenadas e dos momentos

- As representações $\vec{r}$ e $\vec{p}$.

Lembram da bases? $\begin{cases} \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta(\vec{r}-\vec{r}_0) = \lim_{\epsilon\to 0} \xi^{(\epsilon)}_{\vec{r}_0}(\vec{r}), \\ \\ v_{\vec{p}_0}(\vec{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_0\cdot\vec{r}} = \lim_{L\to\infty} v^{(L)}_{\vec{p}_0}(\vec{r}), \end{cases}$

faremos a seguinte associação ($\vec{r}_0$ e $\vec{p}_0$ têm três índices contínuos cada):

$$\boxed{\begin{array}{ccc} \mathcal{E}_{\vec{r}} & \longleftrightarrow & \mathfrak{F} \\ |\vec{r}_0\rangle & \Longleftrightarrow & \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \\ |\vec{p}_0\rangle & \Longleftrightarrow & v_{\vec{p}_0}(\vec{r}) \end{array}}$$

- Ortonormalização

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

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

- Completeza

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

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

Representação das coordenadas e dos momentos

- Componentes de um ket $|\psi\rangle$ nas bases $\{|\vec{r}_0\rangle\}$ e $\{|\vec{p}_0\rangle\}$.
  - Para obter as componentes na base $\{|\vec{r}_0\rangle\}$, use seu operador unidade:

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \int d^3r_0\ |\vec{r}_0\rangle\langle\vec{r}_0|\psi\rangle \text{ com } \langle\vec{r}_0|\psi\rangle = \int d^3r\ \xi^\star_{\vec{r}_0}(\vec{r})\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}_0),$$

  - Para obter as componentes na base $\{|\vec{p}_0\rangle\}$, use seu operador unidade:

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \int d^3p_0\ |\vec{p}_0\rangle\langle\vec{p}_0|\psi\rangle \text{ com } \langle\vec{p}_0|\psi\rangle = \int d^3r\ v^\star_{\vec{p}_0}(\vec{r})\psi(\vec{r}) = \bar{\psi}(\vec{p}_0),$$

$$\text{onde} \begin{cases} \langle\vec{r}_0|\psi\rangle = \psi(\vec{r}_0) \text{ é a componente de } |\psi\rangle \text{ na base } \{|\vec{r}_0\rangle\} \\ \\ \langle\vec{p}_0|\psi\rangle = \bar{\psi}(\vec{p}_0) \text{ é a componente de } |\psi\rangle \text{ na base } \{|\vec{p}_0\rangle\} \end{cases}$$

- Caso 1: $|\psi\rangle = |\vec{p}_0\rangle$

$$\boxed{\langle\vec{r}_0|\psi\rangle = \langle\vec{r}_0|\vec{p}_0\rangle = v_{\vec{p}_0}(\vec{r}_0) = (2\pi\hbar)^{-3/2}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_0\cdot\vec{r}_0}}$$

- Caso 2: $|\psi\rangle = |\vec{r}_0{}'\rangle$

$$\boxed{\langle\vec{r}_0|\psi\rangle = \langle\vec{r}_0|\vec{r}_0{}'\rangle = \xi_{\vec{r}_0{}'}(\vec{r}_0) = \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}_0{}')}$$

Representação das coordenadas e dos momentos

- Uma pequena mudança de notação. Usaremos $\begin{cases} \langle\vec{r}|\psi\rangle = \psi(\vec{r}), \\ \langle\vec{p}|\psi\rangle = \bar{\psi}(\vec{p}), \\ \langle\vec{r}|\vec{r}\,'\rangle = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \\ \langle\vec{p}|\vec{p}\,'\rangle = \delta(\vec{p}-\vec{p}\,') \\ \int d^3r\ |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}| = \mathbb{1} \\ \int d^3p\ |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| = \mathbb{1} \end{cases}$
- $|\vec{r}\rangle = |x, y, z\rangle \rightarrow$ 3 índices contínuos
- $|\vec{p}\rangle = |p_x, p_y, p_z\rangle \rightarrow$ 3 índices contínuos
- Lembra do operador unidade $\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \mathbb{1}$?

Como seria esse operador na representação das coordenadas? Isto é, como seria o elemento de matriz deste operador entre $|\vec{r}\rangle$ e $|\vec{r}\,'\rangle$? Basta calcular:

$$\langle\vec{r}|\Big(\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\Big)|\vec{r}\,'\rangle = \langle\vec{r}|\mathbb{1}|\vec{r}\,'\rangle \Rightarrow \sum_i \langle\vec{r}|u_i\rangle\langle u_i|\vec{r}\,'\rangle = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,'),$$

mas essa é a conhecida expressão

$$\boxed{\sum_i u_i(\vec{r})u_i^\star(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')}$$

Representação das coordenadas e dos momentos

- O produto escalar de dois vetores na representação das coordenadas.

  Use o operador unidade da representação para obter:

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\mathbb{1}|\psi\rangle = \langle\varphi|\Big(\int d^3r\ |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\Big)|\psi\rangle = \int d^3r \langle\varphi|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi\rangle = \int d^3r\ \varphi^\star(\vec{r})\psi(\vec{r})$$

- O produto escalar de dois vetores na representação dos momentos.

  Use o operador unidade da representação para obter:

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\mathbb{1}|\psi\rangle = \langle\varphi|\Big(\int d^3p\ |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\Big)|\psi\rangle = \int d^3p \langle\varphi|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\psi\rangle = \int d^3p\ \bar{\varphi}^\star(\vec{p})\bar{\psi}(\vec{p})$$

- Mudança de representação $\vec{r} \leftrightarrow \vec{p}$.

  $\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = \langle\vec{p}|\vec{r}\rangle^\star = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \Rightarrow$ terá papel especial.

  - Suponha que você conheça $\langle\vec{p}|\psi\rangle = \bar{\psi}(\vec{p})$ e queira calcular $\langle\vec{r}|\psi\rangle = \psi(\vec{r})$. Use o operador unidade $\rightarrow \langle\vec{r}|\psi\rangle = \langle\vec{r}|\Big(\int d^3p\ |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\Big)|\psi\rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int d^3p\ e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}\bar{\psi}(\vec{p})$

  - Suponha que você conheça $\langle\vec{r}|\psi\rangle = \psi(\vec{r})$ e queira calcular $\langle\vec{p}|\psi\rangle = \bar{\psi}(\vec{p})$. Use o operador unidade $\rightarrow \langle\vec{p}|\psi\rangle = \langle\vec{p}|\Big(\int d^3r\ |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\Big)|\psi\rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int d^3r\ e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}\psi(\vec{r})$

Representação das coordenadas e dos momentos

- Mudança de representação $\vec{r} \leftrightarrow \vec{p}$ (continuação).

$\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = \langle\vec{p}|\vec{r}\rangle^\star = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \Rightarrow$ tem papel especial.

- ◦ Suponha que você conheça $\langle\vec{r}\,'|A|\vec{r}\rangle = A(\vec{r}\,',\vec{r})$ e queira calcular $\langle\vec{p}\,'|A|\vec{p}\rangle = A(\vec{p}\,',\vec{p})$.

Use o operador unidade $\rightarrow \langle\vec{p}\,'|A|\vec{p}\rangle = \langle\vec{p}\,'|\Big(\int d^3r'\ |\vec{r}\,'\rangle\langle\vec{r}\,'|\Big) A \Big(\int d^3r\ |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\Big)|\vec{p}\rangle$

$$\langle\vec{p}\,'|A|\vec{p}\rangle = \int d^3r' \int d^3r\, \langle\vec{p}\,'|\vec{r}\,'\rangle\langle\vec{r}\,'|A|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = (2\pi\hbar)^{-3}\int d^3r'\int d^3r\, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\,'\cdot\vec{r}\,' + \frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} A(\vec{r}\,',\vec{r}).$$

- ◦ O vice-versa é direto:

$$\langle\vec{r}\,'|A|\vec{r}\rangle = \int d^3p' \int d^3p\, \langle\vec{r}\,'|\vec{p}\,'\rangle\langle\vec{p}\,'|A|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\vec{r}\rangle = (2\pi\hbar)^{-3}\int d^3p'\int d^3p\, e^{+\frac{i}{\hbar}\vec{p}\,'\cdot\vec{r}\,' - \frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} A(\vec{p}\,',\vec{p}).$$

- Os operadores $\vec{R}$ e $\vec{P}$. Comecemos pelo $\vec{R}$.

Definição: $|\psi'\rangle = X|\psi\rangle$, onde X é uma das componentes de $\vec{R} = (X, Y, Z)$.

Na representação $|\vec{r}\rangle$, temos $\langle\vec{r}|\psi'\rangle = \langle\vec{r}|X|\psi\rangle \equiv x\langle\vec{r}|\psi\rangle \ \therefore\ \psi'(\vec{r}) = x\psi(\vec{r})$.

$$\text{Assim temos: } \begin{cases} \langle\vec{r}|X|\psi\rangle = x\langle\vec{r}|\psi\rangle \rightarrow \langle x,y,z|X|\psi\rangle = x\langle x,y,z|\psi\rangle \\ \langle\vec{r}|Y|\psi\rangle = y\langle\vec{r}|\psi\rangle \rightarrow \langle x,y,z|Y|\psi\rangle = y\langle x,y,z|\psi\rangle \\ \langle\vec{r}|Z|\psi\rangle = z\langle\vec{r}|\psi\rangle \rightarrow \langle x,y,z|Z|\psi\rangle = z\langle x,y,z|\psi\rangle \end{cases}$$

Exemplo de uso: $\langle\varphi|X|\psi\rangle = \langle\varphi|\Big(\int d^3r\ |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\Big)X|\psi\rangle = \int d^3r\, \varphi^\star(\vec{r})x\psi(\vec{r})$

Representação das coordenadas e dos momentos

- Os operadores $\vec{R}$ e $\vec{P}$. Agora o $\vec{P}$.

Definição: $|\psi'\rangle = P_x|\psi\rangle$, onde P_x é uma das componentes de $\vec{P} = (P_x, P_y, P_z)$.

Na representação $|\vec{p}\rangle$, temos $\langle\vec{p}|\psi'\rangle = \langle\vec{p}|P_x|\psi\rangle \equiv p_x\langle\vec{p}|\psi\rangle \;\therefore\; \bar{\psi}'(\vec{p}) = p_x\bar{\psi}(\vec{p})$.

$$\text{Assim temos: } \begin{cases} \langle\vec{p}|P_x|\psi\rangle = p_x\langle\vec{p}|\psi\rangle \rightarrow \langle p_x, p_y, p_z|P_x|\psi\rangle = p_x\langle p_x, p_y, p_z|\psi\rangle \\ \langle\vec{p}|P_y|\psi\rangle = p_y\langle\vec{p}|\psi\rangle \rightarrow \langle p_x, p_y, p_z|P_y|\psi\rangle = p_y\langle p_x, p_y, p_z|\psi\rangle \\ \langle\vec{p}|P_z|\psi\rangle = p_z\langle\vec{p}|\psi\rangle \rightarrow \langle p_x, p_y, p_z|P_z|\psi\rangle = p_z\langle p_x, p_y, p_z|\psi\rangle \end{cases}$$

- *Como será que* $\vec{P}$ age na representação $|\vec{r}\rangle$?

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

Note que isso poderia ser escrito da seguinte maneira:

$$\langle\vec{r}|P_x|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left[(2\pi\hbar)^{-3/2}\int d^3p\; e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}\bar{\psi}(\vec{p})\right] = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\langle\vec{r}|\int d^3p\,|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\langle\vec{r}|\psi\rangle.$$

- *Aqui nasce uma relação muito útil:* $\boxed{\langle\vec{r}|\vec{P}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\langle\vec{r}|\psi\rangle.}$
- *Como ficaria* $\langle\varphi|P_x|\psi\rangle$ na representação das coordenadas?

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

Representação das coordenadas e dos momentos

- *Quanto seria* $\langle\vec{r}|[X,P_x]|\psi\rangle$?

$$\langle\vec{r}|[X,P_x]|\psi\rangle = \langle\vec{r}|XP_x - P_xX|\psi\rangle = x\langle\vec{r}|P_x|\psi\rangle - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\langle\vec{r}|X|\psi\rangle =$$

$$= x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\langle\vec{r}|\psi\rangle - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}x\langle\vec{r}|\psi\rangle = i\hbar\langle\vec{r}|\psi\rangle \;\therefore\; \boxed{[X,P_x] = i\hbar}$$

- *Contas semelhantes podem ser feitas para* $\langle\vec{r}|[R_i,P_j]|\psi\rangle$, com $R_i = X, Y,$ ou Z e $P_j = P_x, P_y$ ou P_z. Encontraremos com isso as chamadas relações canônicas de comutação, dadas por:

$$i \text{ ou } j = 1,2,3 \begin{cases} [R_i,R_j] = 0 \\ [P_i,P_j] = 0 \\ [R_i,P_j] = i\hbar\delta_{ij} \end{cases} \quad \text{com} \quad \begin{cases} i \text{ ou } j = 1 \rightarrow x \\ i \text{ ou } j = 2 \rightarrow y \\ i \text{ ou } j = 3 \rightarrow z \end{cases}$$

- As grandezas físicas na Mecânica Clássica costumam ser escritas em termos de $\vec{r}$ e $\vec{p}$. Aprenderemos a relacioná-las com operadores da Mecânica Quântica, $\vec{R}$ e $\vec{P}$, e a álgebra de comutação acima será muito útil.

Os operadores de posição e momento são Hermiteanos

- $\vec{R}$ e $\vec{P}$ são Hermiteanos.
  - Mostrar que o operador posição é Hermiteano é direto. Calcule:

$$\langle\varphi|X|\psi\rangle = \int d^3r\, \varphi^\star(\vec{r})x\psi(\vec{r}) = \Big[\int d^3r\, \psi^\star(\vec{r})x\varphi(\vec{r})\Big]^\star = \langle\psi|X|\varphi\rangle^\star = \langle\varphi|X^\dagger|\psi\rangle$$

  - Para mostrar que o operador momento é Hermiteano, siga estratégia semelhante:

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

$$\langle\varphi|P_x|\psi\rangle = \int dydz\, \underbrace{\frac{\hbar}{i}[\varphi^\star(\vec{r})\psi(\vec{r})]\Big|_{x=-\infty}^{x=+\infty}}_{0,\ \textit{pois uma das duas será zero para } x=\pm\infty.} + \int d^3r\, [\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\varphi(\vec{r})]^\star\psi(\vec{r})$$

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

note que o "i" foi essencial!

- Autovetores de $\vec{R}$.

$$\langle\vec{r}|X|\vec{r}_0\rangle = x\langle\vec{r}|\vec{r}_0\rangle = x\delta(\vec{r}-\vec{r}_0) = x_0\delta(\vec{r}-\vec{r}_0) = x_0\langle\vec{r}|\vec{r}_0\rangle = \langle\vec{r}|x_0|\vec{r}_0\rangle$$

Como vale para $\forall\ \vec{r} \implies X|\vec{r}_0\rangle = x_0|\vec{r}_0\rangle \therefore \begin{cases} X|\vec{r}\rangle = x|\vec{r}\rangle \\ Y|\vec{r}\rangle = y|\vec{r}\rangle \\ Z|\vec{r}\rangle = z|\vec{r}\rangle \end{cases}$

Os operadores de posição e momento são observáveis

- Autovetores de $\vec{P}$.

$$\langle\vec{p}|P_x|\vec{p}_0\rangle = p_x\langle\vec{p}|\vec{p}_0\rangle = p_x\delta(\vec{p}-\vec{p}_0) = p_{0x}\delta(\vec{p}-\vec{p}_0) = p_{0x}\langle\vec{p}|\vec{p}_0\rangle = \langle\vec{p}|p_{0x}|\vec{p}_0\rangle$$

$$\text{Como vale para } \forall\ \vec{p} \quad \Longrightarrow \quad P_x|\vec{p}_0\rangle = p_{0x}|\vec{p}_0\rangle \ \therefore \begin{cases} P_x|\vec{p}\rangle = p_x|\vec{p}\rangle \\ P_y|\vec{p}\rangle = p_y|\vec{p}\rangle \\ P_z|\vec{p}\rangle = p_z|\vec{p}\rangle \end{cases}$$

Comentários:

- Note que $\langle\vec{r}|P_x|\vec{p}\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} = p_x\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} = p_x\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle$

- Note que $\vec{R}$ e $\vec{P}$ são observáveis, pois $\begin{cases} \int d^3r\ |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}| = \mathbb{1} \\ \int d^3p\ |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| = \mathbb{1} \\ \text{e ambos são Hermiteanos.} \end{cases}$

- Note que $x_0,\ y_0,$ e z_0 autovalores de $X,\ Y,$ e Z determinam de forma única o autovetor $|\vec{r}_0\rangle$, $\therefore$ o conjunto de três operadores $X,\ Y,$ e Z formam um CCOC em $\mathcal{E}_{\vec{r}}$.

- O mesmo pode-se dizer sobre $P_x,\ P_y,$ e P_z.