

Observáveis que Comutam

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

Demonstração:

Como A é uma observável, temos $A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle \begin{cases} n=1, 2, \dots \\ i=1 \dots g_n \end{cases}$ 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?

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

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

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

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 $\left\{ \begin{array}{l} (1) \ a_n \text{ é não-degenerado, } g_n = 1 \ \therefore \ |u_n\rangle \text{ é um autovetor comum a } A \text{ e } B. \\ (2) \ a_n \text{ é degenerado (degenerescência } g_n). \text{ O bloco que representa } B, \text{ em geral, não é diagonal.} \end{array} \right.$

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 $\beta_{ji}^{(n)*} = \beta_{ij}^{(n)}$.

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 $\begin{cases} i \rightarrow \text{degenerescência do par} \\ n \rightarrow a_n \text{ autovalor de } A \\ p \rightarrow b_p \text{ autovalor de } B \end{cases}$

- 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

$$AB|u_{n,p}^i\rangle = b_p A|u_{n,p}^i\rangle = b_p a_n |u_{n,p}^i\rangle,$$

$$BA|u_{n,p}^i\rangle = a_n B|u_{n,p}^i\rangle = a_n b_p |u_{n,p}^i\rangle,$$

e subtraia estas equações para obter

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

- $C = A + B$ com $[A, B] = 0$

Aplique C em um elemento da base que diagonaliza simultaneamente A , e B , e obtenha

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

Assim, como $\{|u_{n,p}^i\rangle\}$ 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 $|u_{n,p}^i\rangle$ 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 $\{A, B, C, \dots\}$ é dito CCOC, se:*
 - todas as observáveis comutam aos pares, $[A, B] = [A, C] = [B, C] = \dots = 0$.
 - 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: $\{A, B, C, \dots\}$ 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 $\{A, B, C, \dots\}$ é um CCOC, uma boa notação para o ket seria: $|a_n, b_p, c_r, \dots\rangle$
 - 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

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

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

Representação das coordenadas e dos momentos

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

Lembram da bases? $\left\{ \begin{array}{l} \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \xi_{\vec{r}_0}^{(\epsilon)}(\vec{r}), \\ v_{\vec{p}_0}(\vec{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}_0 \cdot \vec{r}} = \lim_{L \rightarrow \infty} v_{\vec{p}_0}^{(L)}(\vec{r}), \end{array} \right.$

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

$\mathcal{E}_{\vec{r}}$	\longleftrightarrow	\mathfrak{F}
$ \vec{r}_0\rangle$	\iff	$\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$
$ \vec{p}_0\rangle$	\iff	$v_{\vec{p}_0}(\vec{r})$

- Ortonormalização

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

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

- Completeza

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

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

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

Representação das coordenadas e dos momentos

- Uma pequena mudança de notação. Usaremos

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \vec{r} | \psi \rangle = \psi(\vec{r}), \\ \langle \vec{p} | \psi \rangle = \bar{\psi}(\vec{p}), \\ \langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \\ \langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \\ \int d^3r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| = \mathbb{1} \\ \int d^3p |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| = \mathbb{1} \end{array} \right.$$
- $|\vec{r}\rangle = |x, y, z\rangle \rightarrow 3$ 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:

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

mas essa é a conhecida expressão

$$\sum_i u_i(\vec{r}) u_i^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

Representação das coordenadas e dos momentos

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

Use o operador unidade da representação para obter:

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

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

Use o operador unidade da representação para obter:

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

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

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

- 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

$$\text{o operador unidade} \rightarrow \langle \vec{r} | \psi \rangle = \langle \vec{r} | \left(\int d^3 p |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| \right) | \psi \rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3 p e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \bar{\psi}(\vec{p})$$

- 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

$$\text{o operador unidade} \rightarrow \langle \vec{p} | \psi \rangle = \langle \vec{p} | \left(\int d^3 r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| \right) | \psi \rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3 r e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \psi(\vec{r})$$

Representação das coordenadas e dos momentos

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

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

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

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

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

- O vice-versa é direto:

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

- Os operadores \vec{R} e \vec{P} . Começamos 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 $\langle \vec{r} | \psi' \rangle = \langle \vec{r} | X | \psi \rangle \equiv x \langle \vec{r} | \psi \rangle \therefore \psi'(\vec{r}) = x\psi(\vec{r})$.

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

$$\text{Exemplo de uso: } \langle \varphi | X | \psi \rangle = \langle \varphi | \left(\int d^3 r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| \right) X | \psi \rangle = \int d^3 r \varphi^*(\vec{r}) x \psi(\vec{r})$$

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 $|\vec{r}\rangle$?

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

Note que isso poderia ser escrito da seguinte maneira:

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

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

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

Representação das coordenadas e dos momentos

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

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

- 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:

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

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

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

$$\langle \varphi | P_x | \psi \rangle = \underbrace{\int dy dz \frac{\hbar}{i} [\varphi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r})] \Big|_{x=-\infty}^{x=+\infty}}_0 + \int d^3 r \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \varphi(\vec{r}) \right]^* \psi(\vec{r})$$

0, pois uma das duas será zero para $x = \pm\infty$.

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

↳ note que o "i" foi essencial!

- Autovetores de \vec{R} .

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

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

Os operadores de posição e momento são observáveis

- Autovetores de \vec{P} .

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

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

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 .