Propriedades do Operador de Translação

Adotamos $\Im(d\mathbf{x}') = 1 - i\mathbf{K}.d\mathbf{x}'$. Esta escolha satisfaz as 3 primeiras propriedades:

K Hermiteano

1) $\Im^\dagger(d\mathbf{x}')\Im(d\mathbf{x}') = 1$

$$(1 + i\mathbf{K}^\dagger.d\mathbf{x}')(1 - i\mathbf{K}.d\mathbf{x}') = 1 + i(\mathbf{K} - \mathbf{K}).d\mathbf{x}' + \mathcal{O}^2(d\mathbf{x}') = 1 + \mathcal{O}^2(d\mathbf{x}')$$

2) $\Im(d\mathbf{x}')\Im(d\mathbf{x}'') = \Im(d\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'')$

$$(1 - i\mathbf{K}.d\mathbf{x}')(1 - i\mathbf{K}.d\mathbf{x}'') = (1 - i\mathbf{K}.(d\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'') + \mathcal{O}^2(d\mathbf{x}')$$

3) $\Im(-d\mathbf{x}') = \Im^{-1}(d\mathbf{x}')$

$$(1 - i\mathbf{K}.(-d\mathbf{x}')) = (1 + i\mathbf{K}.d\mathbf{x}') = (1 - i\mathbf{K}.d\mathbf{x}')^\dagger = \Im^{-1}(d\mathbf{x}')$$

Uma relação interessante entre $\mathbf{K}$ e $\mathbf{x}$, pode ser obtida a partir das equações:

$$(1) \;\; \to \Im(d\mathbf{x}')\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{x}'\Im(d\mathbf{x}')|\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{x}'|\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle$$

$$(2) \;\; \to \;\; \mathbf{x}\Im(d\mathbf{x}')|\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle = (\mathbf{x}' + d\mathbf{x}')|\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle$$

Tome (2)-(1) $\to$ $[\mathbf{x}, \Im(d\mathbf{x}')]|\mathbf{x}'\rangle = d\mathbf{x}'|\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle \approx d\mathbf{x}'|\mathbf{x}'\rangle + \mathcal{O}^2(d\mathbf{x}')$

$|x' + dx'\rangle \approx |x'\rangle + \lambda|dx'\rangle ...$

Assim , temos para $\forall\ |\mathbf{x}'\rangle \to [\mathbf{x}, \Im(d\mathbf{x}')] = d\mathbf{x}'$

e $\therefore [\mathbf{x}, -i(\mathbf{K}.d\mathbf{x}')] = -i\mathbf{x}\mathbf{K}.d\mathbf{x}' + i\mathbf{K}.d\mathbf{x}'\mathbf{x} = d\mathbf{x}'$

lousa

Para $d\mathbf{x}' = dx'\hat{\mathbf{i}}$ *ou* $dy'\hat{\mathbf{j}}$ *ou* $dz'\hat{\mathbf{k}}$, *temos* $\boxed{[x_i, K_j] = i\delta_{ij}}$

Momento como um gerador de translação

Qual o significado físico de $\mathbf{K}$? Em mecânica clássica, uma translação infinitesimal pode ser vista como uma transformação canônica do tipo

$X_{novo} \equiv X = x + dx$ e $P_{novo} \equiv P = p$ relação que pode ser obtida

da função geratriz $F(x,P) = x.P + p.dx$ $\begin{cases} p = \frac{\partial F}{\partial x} = P \\ X = \frac{\partial F}{\partial P} = x + dx \end{cases}$

A função geratriz $F(x,P) = x.P$ é a função geratriz da transformação identidade $X = x$ e $P = p$ $\therefore$ especula-se que K está de alguma maneira relacionado com momento

$$K = \frac{P}{\text{cte universal com dimensão de ação}}$$

dimensão de momento angular

$$\Im(d\mathbf{x}') = 1 - i\mathbf{K}.d\mathbf{x}'$$

dimensão de inverso de comprimento

$$\boxed{\Im(d\mathbf{x}') = 1 - i\frac{\mathbf{p}.d\mathbf{x}'}{\hbar}}$$

$\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}$ *mesma que a de L. de Broglie*

Momento como um gerador de translação

A relação $[x_i, K_j] = i\delta_{ij}$ fica $[x_i, \frac{p_j}{\hbar}] = i\delta_{ij} \longrightarrow [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$

e a relação de incerteza $\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A, B]\rangle|^2$, fica

$$\boxed{\langle(\Delta x_i)^2\rangle\langle(\Delta p_j)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}\delta_{ij}}$$

Até agora translações infinitesimais. O que muda para translações finitas?

Que tal construí-la como uma composição sucessiva de translações infinitesimais?

$$\Im(\Delta x'\hat{\mathbf{x}})|\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}' + \Delta x'\hat{\mathbf{x}}\rangle, \text{ onde}$$

$$\Im(\Delta x'\hat{\mathbf{x}}) = \lim_{N\to\infty}(1 - \frac{ip_x\Delta x'}{N\hbar})^N = \exp\left(-\frac{ip_x\Delta x'}{\hbar}\right)$$

Voluntário para demonstrar isso na próxima aula?

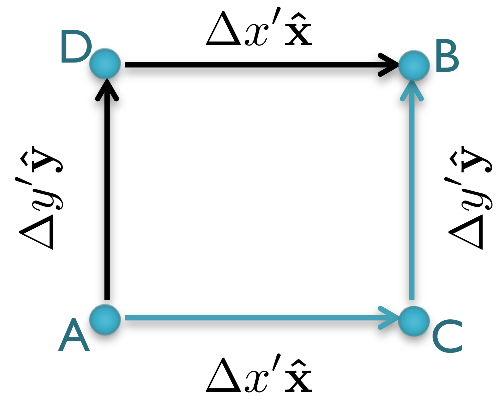
Aqui, a exponencial é função do operador $X = -\frac{ip_x\Delta x'}{\hbar}$ e precisa ser entendida

por $\exp(X) = 1 + X + \frac{X^2}{2!} + \ldots$

Atenção: só p_x é operador

Momento como um gerador de translação

Uma propriedade fundamental das translações é que translações sucessivas em direções diferentes, digamos x e y, comutam.



Cuidado!

$$\Im(\Delta y'\hat{\mathbf{y}})\Im(\Delta x'\hat{\mathbf{x}}) = \exp\left(-\frac{ip_y\Delta y'}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{ip_x\Delta x'}{\hbar}\right) = \exp\left(-i\frac{p_y\Delta y' + p_x\Delta x'}{\hbar}\right) =$$
$$= \Im(\Delta y'\hat{\mathbf{y}} + \Delta x'\hat{\mathbf{x}}) = \Im(\Delta x'\hat{\mathbf{x}})\Im(\Delta y'\hat{\mathbf{y}})$$

$$[\Im(\Delta y'\hat{\mathbf{y}}), \Im(\Delta x'\hat{\mathbf{x}})] = 0 \text{ só se } \left[\exp\left(-\frac{ip_y\Delta y'}{\hbar}\right), \exp\left(-\frac{ip_x\Delta x'}{\hbar}\right)\right] = 0$$

$$\left[\left(1 - \frac{ip_y\Delta y'}{\hbar} - \frac{p_y^2\Delta y'^2}{2\hbar^2} + \dots\right), \left(1 - \frac{ip_x\Delta x'}{\hbar} - \frac{p_x^2\Delta x'^2}{2\hbar^2} + \dots\right)\right] =$$
$$= -\frac{\Delta y'}{\hbar}\frac{\Delta x'}{\hbar}[p_y, p_x] + \mathcal{O}(\Delta y')^2 \text{ ou } \mathcal{O}(\Delta x')^2 \longrightarrow \boxed{[p_y, p_x] = 0}$$

Momento como um gerador de translação: 3d

A hipótese de que as aplicações de operações de translação, em diferentes direções, comutam, implica em $[p_i, p_j] = 0 \;\; \text{p/}\; i$ e $j = x, y, z$. Se as componentes de $\mathbf{p}$ comutam entre si, é possível construir $|\mathbf{p}'\rangle \equiv |p'_x, p'_y, p'_z\rangle$, de tal forma que $p_x|\mathbf{p}'\rangle = p'_x|\mathbf{p}'\rangle; \quad p_y|\mathbf{p}'\rangle = p'_y|\mathbf{p}'\rangle; \quad p_z|\mathbf{p}'\rangle = p'_z|\mathbf{p}'\rangle$

Podemos definir: $|\mathbf{p}'\rangle \equiv |p'_x\rangle \otimes |p'_y\rangle \otimes |p'_z\rangle$ onde $\begin{cases} p_x|\mathbf{p}'\rangle = p_x|p'_x\rangle \otimes |p'_y\rangle \otimes |p'_z\rangle \\ p_y|\mathbf{p}'\rangle = |p'_x\rangle \otimes p_y|p'_y\rangle \otimes |p'_z\rangle \\ p_z|\mathbf{p}'\rangle = |p'_x\rangle \otimes |p'_y\rangle \otimes p_z|p'_z\rangle \end{cases}$

Importante:

Note que $|\mathbf{p}'\rangle$ é autoket de $\Im(d\mathbf{x}')$,

$$\Im(d\mathbf{x}')|\mathbf{p}'\rangle = (1 - i\frac{\mathbf{p}.d\mathbf{x}'}{\hbar})|\mathbf{p}'\rangle = (1 - i\frac{\mathbf{p}'.d\mathbf{x}'}{\hbar})|\mathbf{p}'\rangle, \text{ pois } [\mathbf{p}, \Im(d\mathbf{x}')] = 0$$

O autovalor, entretanto, é complexo $\longrightarrow \Im(d\mathbf{x}')$ *não é Hermiteano*

Relações Fundamentais de Comutação - I

Condições Quânticas Fundamentais (Dirac) $\begin{cases} [x_i, x_j] = 0; \\ [p_i, p_j] = 0; \\ [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \end{cases}$

Dirac observou uma relação direta com a Mecânica Clássica

$[\ ,\ ]_{\text{clássica}} \longrightarrow \dfrac{[\ ,\ ]}{i\hbar}$ onde $[\ ,\ ]_{\text{clássica}}$ é o colchete de Poisson

$$[A(q,p), B(q,p)]_{\text{clássica}} = \sum_s \left(\frac{\partial A}{\partial q_s}\frac{\partial B}{\partial p_s} - \frac{\partial A}{\partial p_s}\frac{\partial B}{\partial q_s}\right)$$

um primeiro exemplo disso é $[x_i, p_j]_{\text{clássica}} = \delta_{ij}$

Clássico ou Quântico, vale o seguinte $\begin{cases} [A, A] = 0 \\ [A, B] = -[B, A] \\ [A, c] = 0 \rightarrow c \text{ é um número} \\ [A + B, C] = [A, C] + [B, C] \\ [A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \\ [A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0 \end{cases}$

Relações Fundamentais de Comutação - II

Ainda com respeito às semelhanças apontadas por Dirac

$[\ ,\ ]_{\text{clássica}} \longrightarrow \frac{[\ ,\ ]}{i\hbar}$ onde $[\ ,\ ]_{\text{clássica}}$ é o colchete de Poisson

$$[A(q,p), B(q,p)]_{\text{clássica}} = \sum_s \left(\frac{\partial A}{\partial q_s}\frac{\partial B}{\partial p_s} - \frac{\partial A}{\partial p_s}\frac{\partial B}{\partial q_s}\right)$$

Existem diferenças importantes. Destacam-se:

- As unidades. Devido às derivadas parciais com respeito à p e q do colchete de Poisson. Note que pq tem unidade de momento angular.
- colchete de Poisson de funções reais de p e q é real, enquanto que o comutador de dois operadores Hermiteano é anti-Hermiteano (valor médio é um imaginário puro).

$$\boxed{\text{O } i\hbar \text{ cuida destas duas diferenças}}$$

A semelhança entre o colchete de Poisson e o comutador da mecânica quântica, apontada por Dirac, ficará mais evidente quando introduzirmos o formalismo de Heisenberg.

Funções de onda no espaço de momentos e de posições

Para simplificar tomemos o espaço unidimensional de posições

$$\text{onde} \begin{cases} 1) & x|x'\rangle = x'|x'\rangle \\ 2) & \langle x'|x''\rangle = \delta(x'-x'') \\ 3) & |\alpha\rangle = \int dx'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \\ 4) & |\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx' \text{ é a probabilidade da partícula ser} \\ & \text{encontrada entre } x' \text{ e } x'+dx'. \end{cases}$$

$\langle x'|\alpha\rangle$ é a já conhecida função de onda de Schrödinger $\psi_\alpha(x')$.

Considere a amplitude de probabilidade $\langle\beta|\alpha\rangle$ interpretada por amplitude de probabilidade para o estado $|\alpha\rangle$ ser encontrado em $|\beta\rangle$. Com auxílio do operador unidade, ela pode ser escrita como

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

uma integral de recobrimento ("overlap") entre duas funções de onda.

Funções de onda no espaço de posições

Como interpretar $|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle$?

Usando a linguagem de funções de onda, isso seria

$$\langle x'|\alpha\rangle = \sum_{a'} \langle x'|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle \longrightarrow \psi_\alpha(x') = \sum_{a'} c^\alpha_{a'} u_{a'}(x')$$

onde, introduzimos as auto-funções, $u_{a'}(x') = \langle x'|a'\rangle$, do operador A com autovalor a'. Nesta representação, o produto $\langle\beta|A|\alpha\rangle$ fica

$$\begin{aligned}\langle\beta|A|\alpha\rangle &= \int dx' \int dx'' \langle\beta|x'\rangle\langle x'|A|x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle \\ &= \int dx' \int dx'' \psi^*_\beta(x')\langle x'|A|x''\rangle\psi_\alpha(x'')\end{aligned}$$

Para calculá-lo precisamos conhecer $\langle x'|A|x''\rangle$, uma função de x' e x''. A vida fica fácil se A for um operador em função de x. Tome como exemplo, $A = x^2 \longrightarrow \langle x'|A|x''\rangle = \langle x'|x^2|x''\rangle = x''^2\delta(x'-x'')$. Neste caso $\langle\beta|A|\alpha\rangle = \int dx'\psi^*_\beta(x')x'^2\psi_\alpha(x')$. Em geral, podemos escrever

operador $\qquad \langle\beta|f(x)|\alpha\rangle = \int dx'\psi^*_\beta(x')f(x')\psi_\alpha(x') \qquad$ não é operador

Operador momento na base de posições

Considere o operador de translação atuando em um ket $|\alpha\rangle$

$$(1 - i\frac{p_x \Delta x'}{\hbar})|\alpha\rangle = \Im(\Delta x')|\alpha\rangle = \int dx' \Im(\Delta x')|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle =$$

$$= \int dx'|x' + \Delta x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \int dx'|x'\rangle\langle x' - \Delta x'|\alpha\rangle =$$

$$= \int dx'|x'\rangle\psi_\alpha(x' - \Delta x') = \int dx'|x'\rangle(\psi_\alpha(x') - \Delta x'\frac{\partial}{\partial x'}\psi_\alpha(x')) =$$

$$= \int dx'|x'\rangle(\langle x'|\alpha\rangle - \Delta x'\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle)$$

Aplicando $\langle x''|$ em ambos os lados e pela esquerda, temos:

$$\langle x''|(1 - i\frac{p_x \Delta x'}{\hbar})|\alpha\rangle = \langle x''|\alpha\rangle - \Delta x'\frac{\partial}{\partial x''}\langle x''|\alpha\rangle$$

Comparação direta fornece $\boxed{\langle x'|p_x|\alpha\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle}$ (troquei x'' por x')

exs.: $\begin{cases} \langle x'|p_x|x''\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|x''\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x' - x'') \\ \langle \beta|p_x|\alpha\rangle = \int dx'\langle\beta|x'\rangle(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle) = \int dx'\psi^*_\beta(x')(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\psi_\alpha(x')) \end{cases}$

Operador momento na base de posições

Mostre que: $$\begin{cases} \langle x'|p_x^n|\alpha\rangle = (-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x'^n}\psi_\alpha(x') \\ \langle\beta|p_x^n|\alpha\rangle = \int dx' \psi_\beta^*(x')(-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x'^n}\psi_\alpha(x') \end{cases}$$

Função de onda no espaço dos momentos

Para simplificar tomemos o espaço unidimensional de momentos

onde $$\begin{cases} 1) \quad p|p'\rangle = p'|p'\rangle \\ 2) \quad \langle p'|p''\rangle = \delta(p'-p'') \\ 3) \quad |\alpha\rangle = \int dp'|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle \\ 4) \quad |\langle p'|\alpha\rangle|^2 dp' \text{ é a probabilidade da partícula ter} \\ \quad\quad \text{momento } p' \text{ no intervalo estreito } dp' \end{cases}$$

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

Se $|\alpha\rangle$ é normalizada, temos

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \int dp'\langle\alpha|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle = \int dp'|\langle p'|\alpha\rangle|^2 = \int dp'|\phi_\alpha(p')|^2 = 1$$

Conexão entre as representações de momento e de posição

Para fazer isso, considere $\langle x'|p|\alpha\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle$ com $|\alpha\rangle = |p'\rangle$

Assim, $\langle x'|p|p'\rangle = p'\langle x'|p'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|p'\rangle \rightarrow \langle x'|p'\rangle = Nexp(\frac{ip'x'}{\hbar})$

Para obter a constante de normalização, considere

use $p' = \hbar k$

$$\langle x'|x''\rangle = \delta(x' - x'') \equiv \frac{1}{2\pi}\int dk\ exp[ik(x' - x'')]$$

$$\langle x'|x''\rangle = \int dp'\langle x'|p'\rangle\langle p'|x''\rangle = |N|^2\int dp' exp[\frac{ip'(x' - x'')}{\hbar}]$$

$$\delta(x' - x'') = |N|^2 2\pi\hbar\delta(x' - x'') \longrightarrow |N|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$$

E assim, temos $\langle x'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}exp(\frac{ip'x'}{\hbar})$

Duas relações interessantes

$$\langle x'|\alpha\rangle = \psi_\alpha(x') = \int dp'\langle x'|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp' exp(+\frac{ip'x'}{\hbar})\phi_\alpha(p')$$

$$\langle p'|\alpha\rangle = \phi_\alpha(p') = \int dx'\langle p'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx' exp(-\frac{ip'x'}{\hbar})\psi_\alpha(x')$$

A função de onda no espaço das posições é a transformada de Fourier da função de onda no espaço dos momentos (e vice-versa).

Lousa do slide 1

Tome $d\mathbf{x}' = dx'\hat{\mathbf{i}}$ em

$$-i\mathbf{x}\mathbf{K}.d\mathbf{x}' + i\mathbf{K}.d\mathbf{x}'\mathbf{x} = d\mathbf{x}'$$

$$-i\mathbf{x}\mathbf{K}.(dx'\hat{\mathbf{i}}) + i\mathbf{K}.(dx'\hat{\mathbf{i}})\mathbf{x} = dx'\hat{\mathbf{i}}, \rightarrow \text{ mas } \mathbf{K}.(dx'\hat{\mathbf{i}}) = K_i dx'$$

$$-i\mathbf{x}K_i dx' + iK_i dx'\mathbf{x} = dx'\hat{\mathbf{i}} \rightarrow \text{ divide a equação por } dx'$$

$$-i\mathbf{x}K_i + iK_i\mathbf{x} = \hat{\mathbf{i}} \rightarrow \text{ multiplica a equação por } i$$

$$\mathbf{x}K_i - K_i\mathbf{x} = i\hat{\mathbf{i}} \rightarrow \text{ essa é uma equação vetorial}$$

$$(x_i\hat{\mathbf{i}} + x_j\hat{\mathbf{j}} + x_k\hat{\mathbf{k}})K_i - K_i(x_i\hat{\mathbf{i}} + x_j\hat{\mathbf{j}} + x_k\hat{\mathbf{k}}) = i\hat{\mathbf{i}}$$

Uma equação vetorial que precisa ser satisfeita nas 3 direções, $\hat{\mathbf{i}}, \hat{\mathbf{j}},$ e $\hat{\mathbf{k}}$,

$$\text{ou seja} \begin{cases} \text{Na direção } \hat{\mathbf{i}} \rightarrow x_i K_i - K_i x_i = i \\ \text{Na direção } \hat{\mathbf{j}} \rightarrow x_j K_i - K_i x_j = 0 \\ \text{Na direção } \hat{\mathbf{k}} \rightarrow x_k K_i - K_i x_k = 0 \end{cases}$$

$$\text{Repita o procedimento para} \begin{cases} d\mathbf{x}' = dy'\hat{\mathbf{j}} \\ d\mathbf{x}' = dz'\hat{\mathbf{k}} \end{cases}$$

Volta para slide 1