§ Representação de Coordenadas e de Momentos

Consideramos primeiro o caso de 1-dim. Já definimos previamente a função de onda em termo da base dos kets da posição:

$$\psi_\alpha(x') \equiv \langle x'|\alpha\rangle$$

O produto escalar entre dois kets arbitrários fica:

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

de maneira que $\langle\beta|\alpha\rangle$ carateriza o "overlap" entre as duas funções de onda. Consideremos agora a expansão em termos de uma base $\{|a'\rangle\}$:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle .$$

Passemos agora para a representação da posição:

$$\langle x'|\alpha\rangle = \sum_{a'} \langle x'|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle$$

Introduzindo as autofunções do operador A com auto-valor a'

$$u_{a'}(x') \equiv \langle x'|a'\rangle ,$$

a expansão fica:

$$\psi_a(x') = \sum_{a'} c_{a'}\, u_{a'}(x') \quad ,$$

com os coeficientes lineares $c_{a'} \equiv \langle a'|\alpha\rangle$. Vamos a traduzir agora o termo $\langle\beta|A|\alpha\rangle$ em termo das funções de onda:

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

onde, em geral $\langle x'|A|x''\rangle$ é uma função de x' e x''.

<u>Ex</u>. $A = x^2$

$$\langle x'|\; x^2|x''\rangle = (x'')^2\langle x'|x''\rangle = (x')^2\delta(x'-x'')$$

$$\langle\beta|x^2|\alpha\rangle = \int dx'\, \psi^*_\beta(x')\, x'^2\, \psi_\alpha(x')$$

Uma situação semelhante acontece para qualquer função $f(x)$ do operador posição:

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

Encontremos agora o operador momentum na base da posição. Usamos o fato que $\vec{p}$ é o gerador infinitesimal das translações (continuamos trabalhando em 1-dim):

$$\mathcal{T}(\Delta x')|\alpha\rangle = \left(1-\frac{i}{\hbar}p_x\Delta x'\right)|\alpha\rangle =$$

$$= \int dx'\, \mathcal{T}(\Delta x')|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle$$

$$= \int dx'\, |x'+\Delta x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \int dx'\, |x'+\Delta x'\rangle\, \psi_\alpha(x')$$

$$= \int dx'\, |x'\rangle\, \psi_\alpha(x'-\Delta x')$$

Expandimos a função de onda:

$$\psi_\alpha(x'-\Delta x') = \psi_\alpha(x') - \Delta x' \frac{\partial}{\partial x'}\psi_\alpha(x')$$

Comparando os termos de 1ª ordem:

$$-\frac{i}{\hbar}\cancel{\Delta x'}\, p_x|\alpha\rangle = -\cancel{\Delta x'}\int dx'\,|x'\rangle \frac{\partial}{\partial x'}\psi_\alpha(x')$$

$$p_x|\alpha\rangle = \int dx'\,|x'\rangle\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)\psi_\alpha(x')$$

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

de onde obtemos:

$$\boxed{\langle x'|p_x|\alpha\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle}$$

Em particular:

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

Uma identidade importante:

$$\langle\beta|p_x|\alpha\rangle = \int dx'\langle\beta|x'\rangle\langle x'|p_x|\alpha\rangle$$
$$= \int dx'\,\psi^*_\beta(x')\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\psi_\alpha(x')\right)$$

Calculemos $\langle x'|p_x^2|\alpha\rangle$

$$\langle x'|p_x^2|\alpha\rangle = \int dx''\langle x'|p_x|x''\rangle\langle x''|p_x|\alpha\rangle$$
$$= \int dx''\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x'')\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\langle x''|\alpha\rangle\right)$$
$$= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\int dx''\,\delta(x'-x'')\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\langle x''|\alpha\rangle\right)$$
$$= \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle\right) = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)^2\langle x'|\alpha\rangle$$

Assim, por indução obtemos:

$$\boxed{\langle x'|p_x^n|\alpha\rangle = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)^n\langle x'|\alpha\rangle}$$

e para as funções de onda:

$$\boxed{\langle\beta|p_x^n|\alpha\rangle = \int dx' \, \psi_\beta^*(x') \, (-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x'^n} \psi_\alpha(x')}$$

Representação de Momentum (1-dim)

Por simetria, consideramos agora a base do operador momentum

$$p|p'\rangle = p'|p'\rangle$$
$$\langle p'|p''\rangle = \delta(p'-p'')$$
$$|\alpha\rangle = \int dp' \, |p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle$$

De mesma maneira que para função de onda $\psi_\alpha(x')$ na representação da posição, podemos dar uma interpretação probabilística para o coeficiente $\langle p'|\alpha\rangle$:

A probabilidade de medir p com autovalor p' no intervalo $(p', p'+dp')$ é

$$|\langle p'|\alpha\rangle|^2 dp'$$

• Def: Função de onda no espaço de momentum

$$\phi_\alpha(p') \equiv \langle p'|\alpha\rangle$$

Se o ket $|\alpha\rangle$ está normalizado obtemos:

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

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

Queremos agora encontrar a transformação que da a mudança da base $\{|x'\rangle\} \to \{|p'\rangle\}$. Nas relações encontradas antes colocamos $|a\rangle = |p'\rangle$

$$\langle x'|p|p'\rangle = -i\hbar \, \partial_{x'} \langle x'|p'\rangle$$

$$= p' \langle x'|p'\rangle$$

ou $$\partial_{x'} \langle x'|p'\rangle = \frac{i}{\hbar} p' \langle x'|p'\rangle,$$

que é uma equação diferencial para o coeficiente $\langle x'|p'\rangle$ da mudança da base. Solução:

$$\langle x'|p'\rangle = C(p') \exp\left(\frac{i}{\hbar} p'x'\right),$$

onde C é uma constante de normalização que deverá ser determinada. Calculemos:

$$\langle p''|p'\rangle = \delta(p''-p') = \int dx' \langle p''|x'\rangle\langle x'|p'\rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \; C^*(p'') \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p''x'\right) C(p') \exp\left(\frac{i}{\hbar} p'x'\right)$$

$$= C^*(p'') C(p') \int_{-\infty}^{\infty} dx' \; \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p'-p'')x'\right]$$

$$= 2\pi\hbar C^*(p'')C(p')\;\delta(p''-p') = 2\pi\hbar|C(p')|^2\delta(p'-p''),$$

onde temos usado a representação da delta de Dirac

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx\; e^{ipx} = \delta(p).$$

Temos então que:

$$|C(p')| = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}},$$

e exceto por uma fase constante temos:

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

As tranformações das representações fornecem

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

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

e para as funções de onda

Tranformada e anti-transformada de Fourier

$$\boxed{\begin{aligned}\psi_\alpha(x') &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} dp'\; e^{\frac{i}{\hbar}p'x'}\,\phi_\alpha(p')\\ \phi_\alpha(p') &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} dx'\; e^{-\frac{i}{\hbar}p'x'}\,\psi_\alpha(x')\end{aligned}}$$

§ Generalização para 3-dim

As 3 componentes da posição comutam entre si, de maneira que

$$\vec{x}\,|\vec{x}'\rangle = \vec{x}'\,|\vec{x}'\rangle \;, \quad \vec{x}' = (x', y', z').$$

A mesma coisa acontece com o momentum linear $\vec{p}$

$$\vec{p}\,|\vec{p}'\rangle = \vec{p}'\,|\vec{p}'\rangle \;, \quad \vec{p}' = (p_x, p_y, p_z)$$

Def: $\delta^{(3)}(\vec{x}' - \vec{x}'')$

$$\delta^{(3)}(\vec{x}' - \vec{x}'') \equiv \delta(x' - x'')\,\delta(y' - y'')\,\delta(z' - z'')$$

As relações de ortogonalidade ficam como

$$\langle \vec{x}' | \vec{x}'' \rangle = \delta^{(3)}(\vec{x}' - \vec{x}'') \;, \quad \langle \vec{p}' | \vec{p}'' \rangle = \delta^{(3)}(\vec{p}' - \vec{p}'')$$

As relações de completeza:

$$\int d^3x'\, |\vec{x}'\rangle\langle \vec{x}'| = 1 \;, \qquad \int d^3p'\, |\vec{p}'\rangle\langle \vec{p}'| = 1$$

Expansão de um ket arbitrário $|\alpha\rangle$:

$$|\alpha\rangle = \int d^3x'\, |\vec{x}'\rangle\langle \vec{x}'|\alpha\rangle \;, \quad |\alpha\rangle = \int d^3p'\, |\vec{p}'\rangle\langle \vec{p}'|\alpha\rangle$$

Funções de onda:

$$\psi_\alpha(\vec{x}') \equiv \langle \vec{x}'|\alpha\rangle \;, \qquad \phi_\alpha(\vec{x}') \equiv \langle \vec{x}'|\alpha\rangle$$

$$\langle\beta|\vec{p}|\alpha\rangle = \int d^3x' \langle\beta|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\vec{p}|\alpha\rangle$$
$$= \int d^3x' \, \psi_\beta^*(\vec{x}')\left(-i\hbar\nabla\right)\psi_\alpha(\vec{x}')$$

Mudança da base:

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

e as correspondentes funções de onda estão ligadas por transformadas de Fourier tridimensionais.

§ ALGUMAS PROPRIEDADES de OPERADORES

Seja A um operador linear arbitrário. O operador A^n pode fácilmente ser definido como a aplicação sucessiva (até n vezes) do operador.

Queremos definir agora uma função arbitrária do operador. Consideremos uma função $F(z)$, função analítica da variável z (num determinado domínio). Ali $F(z)$ pode ser expandida como série de Taylor. Sem perda de generalidade supomos que a série tem centro em $z=0$,

$$F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n z^n$$

▶ Def. A função correspondente do operador A, $F(A)$ é definida usando os mesmos coeficientes da série:

$$F(A) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n A^n$$

Exemplos

1. Operador exponencial

$$\exp A = e^A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n$$

$$= 1 + \frac{1}{1!} A + \frac{1}{2!} A^2 + \cdots\cdots + \frac{1}{n!} A^n + \cdots$$

2. Serie geométrica

$$\frac{1}{1-A} = 1 + A + A^2 + \dots A^n \dots = \sum_{n=0}^{\infty} A^n$$

A convergência das séries dos operadores depende dos autovalores destes e do raio de convergência da série original de $F(z)$.

Seja agora A um operador hermiteano, e $\{|a\rangle\}_a$ o correspondente sistema completo dos autoestados de A:

$$A|a\rangle = a|a\rangle$$

Temos:
$$A^2|a\rangle = aA|a\rangle = a^2|a\rangle$$
$$\vdots$$
$$A^n|a\rangle = a^n|a\rangle$$

Assim usando a linearidade

$$f(A)|a\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f_n A^n |a\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f_n a^n |a\rangle = f(a)|a\rangle$$

e a correspondente decomposição espectral:

$$f(A) = f(A)\cdot 1 = f(A)\sum_a |a\rangle\langle a|$$

$$= \sum_a f(A)|a\rangle\langle a| = \sum_a f(a)|a\rangle\langle a|$$

§ DERIVAÇÃO de um OPERADOR

Assumamos que um operador A é função de um parâmetro t (por exemplo o tempo). Definimos a derivada $\frac{dA}{dt}$ do operador pelo limite (se existir):

$$\frac{dA}{dt} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{A(t+\Delta t) - A(t)}{\Delta t}$$

Seja $\{|i\rangle\}_i$ uma base qualquer. Definimos os elementos de matriz

$$\left(\frac{dA}{dt}\right)_{ij} \equiv \langle i | \frac{dA}{dt} | j \rangle$$

Da definição de derivada temos:

$$\langle i | \frac{A(t+\Delta t) - A(t)}{\Delta t} | j \rangle = \frac{\langle i | A(t+\Delta t) | j \rangle - \langle i | A(t) | j \rangle}{\Delta t}$$

e

$$\left(\frac{dA}{dt}\right)_{ij} = \langle i | \lim_{\Delta t \to 0} \frac{A(t+\Delta t) - A(t)}{\Delta t} | j \rangle$$

$$= \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\langle i | A(t+\Delta t) | j \rangle - \langle i | A(t) | j \rangle}{\Delta t}$$

$$= \frac{d}{dt} A_{ij}(t)$$

com $\quad A_{ij}(t) \equiv \langle i | A(t) | j \rangle$

Exemplo. Identidade útil

Sejam A, B dois operadores tais que ambos comutam com $[A,B]$. Neste caso temos a relação:

$$e^A e^B = e^{A+B} \, e^{\frac{1}{2}[A,B]}$$

Dem. Seja o operador $F(t)$ função da variável real t:

$$F(t) = e^{At} e^{Bt}$$

Derivando temos:

$$\frac{d}{dt}F(t) = A e^{At} e^{Bt} + e^{At} B e^{Bt}$$
$$= \left(A + e^{At} B e^{-At}\right) e^{At} e^{Bt}$$

1º devemos mostrar que e^{-At} é o inverso de e^{At}.

Seja $f(t) \equiv e^{At} e^{-At}$

$$\frac{d}{dt}f(t) = A e^{At} e^{-At} - e^{At} A e^{-At}$$
$$= (A - A) e^{At} e^{-At} = 0$$

$$\Rightarrow \quad f(t) = C = \text{constante} = f(0)$$

$$f(0) = C = 1 \cdot 1 = 1$$

logo $\qquad f(t) = e^{At} e^{-At} = 1$

Continuando:

$$\frac{dF}{dt} = \left(A + e^{At} B e^{-At}\right) F(t)$$

Calcular: $e^{At} B e^{-At} = \left(1 + At + \frac{A^2 t^2}{2!} + \dots\right) B \left(1 - At + \dots\right)$

$$= B + (AB - BA)t + t^2\left(\frac{1}{2}A^2 B + \frac{1}{2}BA^2 - ABA\right) + \dots$$

$$= B + [A,B]t + \frac{t^2}{2!}\left(A^2B + BA^2 - 2ABA\right)\dots$$

$$= B + [A,B]t + \left\{A(AB-BA) + (BA-AB)A\right\}\frac{t^2}{2!} + \dots$$

$$= B + t[A,B] + \frac{t^2}{2!}\Big[A,[A,B]\Big] + \dots$$

Aparecem sucessivos comutadores de ordem superior. Como os operadores comutam com seu comutador temos:

$$e^{At}\,B\,e^{-At} = B + t[A,B],$$

logo:

$$\frac{dF}{dt} = \left(A + B + t[A,B]\right)F(t)$$

Integrando esta equação obtemos:

$$F(t) = F(0)\; e^{(A+B)t + \frac{1}{2}t^2[A,B]},$$

com $t=0$ devemos ter a identidade $\Rightarrow F(0) = 1$

Conclusão:

$$F(t) = e^{At}\,e^{Bt} = e^{(A+B)t + \frac{1}{2}t^2[A,B]}$$

e tomando $t=1$, obtemos

$$e^{A}\,e^{B} = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]}.$$