Diagonalização

• $[A,B]\neq 0$. Escrevo B na base de auto-est. de $A = \{|a_i\rangle\}$. Como achar seus auto-vetores? -valores. É um problema de álgebra linear, vejamos usando a notação de Dirac.

$$B|b_i\rangle = b_i|b_i\rangle \qquad [\cdot\langle a_j|]$$

$$\langle a_j|\underset{\hat{1}}{B}|b_i\rangle = b_i\langle a_j|b_i\rangle$$

$$= \sum_K \langle a_j|B|a_K\rangle\langle a_K|b_i\rangle = b_i\langle a_j|b_i\rangle$$

· Em notação matricial

$$\underset{B}{\begin{pmatrix} & & \\ & & \\ & & \end{pmatrix}}\underset{|b_i\rangle}{\begin{pmatrix} \\ \\ \end{pmatrix}} = b_i\underset{|b_i\rangle}{\begin{pmatrix} \\ \\ \end{pmatrix}}$$

⇒ Auto-valores e autovetores são encontrados como vimos em Álgebra Linear.

· Repare que a Hermiticidade de B é importante ⇒ garante a existência de base completa de autovetores

Observáveis equivalentes (por transf. unitárias)

• 2 ~~conj~~ bases $\{|a_i\rangle\}$, $\{|b_i\rangle\}$, conectados por $U = \sum_K |b_K\rangle\langle a_K|$.

Teorema: Podemos construir um novo op. a partir de A: UAU^{-1}.
U e UAU^{-1} são chamados de observáveis equivalentes sob transf. unitária.

Se $A|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle \Rightarrow UA\underbrace{U^{-1}U}_{=\mathbb{1}}|a_i\rangle = a_i U|a_i\rangle$

$\Leftrightarrow (UAU^{-1})|b_i\rangle = a_i|b_i\rangle$

$\Rightarrow$ A e UAU^{-1} têm o mesmo espectro.

• e autovetores?

$B|b_i\rangle = b_i|b_i\rangle$ comparando com vemos que UAU^{-1} e B

são diagonalizáveis simultaneamente

↳ mesmos auto-vetores.

• Às vezes, UAU^{-1} e B são o mesmo observável. Ex: S_x e S_z se relacionam por op. unitária, e são o mesmo op. (componente de momento angular)
↳ = rotação em torno de y, ângulo $\frac{\pi}{2}$. | em direções diferentes

Posição, momento e translação

- Grandezas como posição e momento são representados por observáveis atuando num espaço de Hilbert de dimensão <u>infinita</u>.
- Vários dos resultados ~~...~~ matemáticos que vimos p/ $\mathcal{H}$ de dim. finita se generalizam, mas vamos apontar alguns que <u>não</u>.

dim($\mathcal{H}$) finita		dim($\mathcal{H}$) infinita
$A\|a_i\rangle = a_i\|a_i\rangle$	$\xrightarrow{\text{generaliza como}}$	$\xi\|\xi'\rangle = \xi'\|\xi'\rangle$
		ξ: op. ; ξ': número
δ_{ij} delta de Kronecker	$\rightarrow$	$\delta(\xi-\xi')$ delta de Dirac
$\sum_i a_i$	$\rightarrow$	$\int d\xi'$
$\langle a_i\|a_j\rangle$	$\rightarrow$	$\langle\xi'\|\xi''\rangle = \delta(\xi'-\xi'')$
$\sum_i \|a_i\rangle\langle a_i\| = \mathbb{1}$	$\rightarrow$	$\int d\xi'\|\xi'\rangle\langle\xi'\| = \mathbb{1}$
$\|\alpha\rangle = \sum_i \|a_i\rangle\langle a_i\|\alpha\rangle$	$\rightarrow$	$\|\alpha\rangle = \int d\xi'\|\xi'\rangle\langle\xi'\|\alpha\rangle$
$\sum_i \|\langle a_i\|\alpha\rangle\|^2 = 1$	$\longrightarrow$	$\int d\xi'\|\langle\xi'\|\alpha\rangle\|^2 = 1$
$\langle\beta\|\alpha\rangle = \sum_i \langle\beta\|a_i\rangle\langle a_i\|\alpha\rangle$	$\rightarrow$	$\langle\beta\|\alpha\rangle = \int d\xi'\langle\beta\|\xi'\rangle\langle\xi'\|\alpha\rangle$
$\langle a_i\|A\|a_j\rangle = a_j\delta_{ij}$	$\longrightarrow$	$\xi'\delta(\xi''-\xi')$

Medidas de posição de part. 1D

$X|x'\rangle = x'|x'\rangle$ → postulamos que formam conj. completo.

op. ; núm. (dimensão do comprimento)

$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' |x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle$ ← expansão de ket $|\alpha\rangle$ arbitrário na base $\{|x'\rangle\}$.

- Medida de posição (idealizada) → resultado x' → colapso no auto-estado $|x'\rangle$
- Medida de posição (+ realista)
  - Localiza part. no intervalo $(x' - \frac{\Delta}{2}, x' + \frac{\Delta}{2})$.
  - Colapso:

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx'' |x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle \xrightarrow[\text{result. } x']{\text{Medida } \hat{X}} \int_{x'-\frac{\Delta}{2}}^{x'+\frac{\Delta}{2}} dx'' |x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle$$

  - Se $\langle x'|\alpha\rangle$ ~~muda~~ varia pouco no intervalo, a prob. do detetor "clicar" é $|\langle x'|\alpha\rangle|^2 \underbrace{dx'}_{\cong \Delta}$ ⟷ análogo ao caso ~~com~~ dim$(\mathcal{H})$ finita.
  - Prob. de encontrar a partícula em algum ponto da reta real:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx' |\langle x'|\alpha\rangle|^2.$$ Se $|\alpha\rangle$ é normalizado:

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle\alpha|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = 1$$

- $\langle x'|\alpha\rangle$ é o que chamamos de <u>função de onda</u> $\psi_\alpha(x')$ – voltaremos a isso + tarde

- Podemos generalizar p/ espaço 3D:

$$|\alpha\rangle = \int d^3x' \, |\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\alpha\rangle$$, com $\vec{x}' = (x', y', z')$ auto-estado simultâneo de x, y, z :

$$x|\vec{x}'\rangle = x'|\vec{x}'\rangle$$
$$y|\vec{x}'\rangle = y'|\vec{x}'\rangle$$
z " "

- Para ~~[illegible]~~ que os auto-estados simultâneos existam precisamos que $[x_i, x_j] = 0 \qquad i, j = x, y, z.$

- Para ver que isso é verdade, precisamos discutir a relação entre posição e momento — estudando translações.

TRANSLAÇÃO

- Começamos com estado bem-localizado em torno de $\vec{x}'$: $|\vec{x}'\rangle$.
- O op de translação infinitesimal transforma $|\vec{x}'\rangle$ em $|\vec{x}' + d\vec{x}'\rangle$, que é estado bem-localizado em $|\vec{x}'+d\vec{x}'\rangle$.

$$\mathcal{T}(d\vec{x}')|\vec{x}'\rangle = |\vec{x}' + d\vec{x}'\rangle$$
escolhemos fase = 1 por convenção.

[Obviamente $|\vec{x}'\rangle$ não é auto-vetor de $\mathcal{T}$]

- Expando $|\alpha\rangle$ em $\{|x'\rangle\}$ p/ ver como $\mathcal{T}$ atua em vetor arbitrário:

$$|\alpha\rangle \to \mathcal{T}(d\vec{x}')|\alpha\rangle = \mathcal{T}(d\vec{x}')\int d^3x' \, |\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\alpha\rangle = \int d^3x' \, |\vec{x}'+d\vec{x}'\rangle\langle x'|\alpha\rangle$$

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

integral em todo o espaço ~~[illegible]~~ troquei variável de integração p/ $\vec{x}'' = \vec{x}' + d\vec{x}'$

Conclusão: o estado transladado é obtido trocando $\langle\vec{x}'|\alpha\rangle$ por $\langle\vec{x}' - d\vec{x}'|\alpha\rangle$.

- Há outra abordagem p/ estudar translação:
  - olhar como o mesmo ket $|\alpha\rangle$ fica p/ um observador cujo sist. de coordenadas é transladado por $-d\vec{x}'$.
  - cuidado p/ não misturar as abordagens: ativa (aqui), passiva

(SAKURAI)

- Propriedades de $\mathcal{T}(d\vec{x}')$:

[Aqui ler p. 45a e 45b – Propriedades gerais de transformação]

I) Unitariedade.

[Teorema (Wigner): Qq. mapa de $\mathcal{H}\to\mathcal{H}$ que preserva $|\langle\phi|\psi\rangle|$ $\forall\, |\phi\rangle, |\psi\rangle$ tem que ser unitário ou anti-unitário.

Corolário: transformações contínuas têm que ser unitárias [ver Ball. 3.1]

UNITÁRIO: $UU^{+} = U^{+}U = \mathbb{1}$. $\langle\phi'|\psi'\rangle = (\langle\phi|U^{+})(U|\psi\rangle) = \langle\phi|\psi\rangle$.

ANTI-UNITÁRIO: (ANTI-LINEAR) $U\,c|\psi\rangle = c^{*}U|\psi\rangle \Rightarrow \langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^{*}$.

- Com $\mathcal{T}(d\vec{x}')$ unitário, a norma de $|\alpha\rangle$ é preservada.

II) Composição $\quad \mathcal{T}(d\vec{x}'')\mathcal{T}(d\vec{x}') = \mathcal{T}(d\vec{x}'+d\vec{x}'')$

III) Inverso $\quad \mathcal{T}(-d\vec{x}') = \mathcal{T}^{-1}(d\vec{x}')$

IV) Limite de pequenas translações: $\displaystyle\lim_{d\vec{x}'\to 0}\mathcal{T}(d\vec{x}') = \mathbb{1}$.

- Vamos agora mostrar que $\boxed{\mathcal{T}(d\vec{x}') = \mathbb{1} - i\vec{K}\cdot d\vec{x}'}$ tem as propriedades desejadas. $\vec{K} = (K_x, K_y, K_z)$ com K_x, K_y, K_z hermitianos.

TRANSLAÇÕES e outras transformações

- Translações são exemplos de transformações de estado. Para preservar a norma, qualquer transformação U tem que ser

UNITÁRIA : $UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{1}$. $\begin{cases} |\psi\rangle \to U|\psi\rangle = |\psi'\rangle \\ |\phi\rangle \to U|\phi\rangle = |\phi'\rangle \end{cases}$

~~ANTI-UNITÁRIA~~

$\Rightarrow \langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\phi|U^\dagger U|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle$.

ou

ANTI-UNITÁRIA: $UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{1}$ mas

(ANTI-LINEAR): $\underline{Uc|\psi\rangle = c^* U|\psi\rangle}$

[← Teorema de Wigner]

- Só operadores lineares podem descrever transformações contínuas.
  - $U_{AL} \cdot U_{AL} = U_L$
  - U não pode mudar continuamente de linear $\Leftrightarrow$ anti-linear

  $\Rightarrow$ transf contínuas devem ser lineares $\Rightarrow$ unitárias.

- Por simplicidade, vamos considerar uma família de operadores $U(s)$ que só depende de um parâmetro (s). Escolhemos o parâmetro tal que

$$\begin{cases} U(0) = \mathbb{1} & [s=0 \text{ faz } U(0) \text{ ser a identidade}] \\ U(s_1+s_2) = U(s_1)U(s_2) & [\text{transformações se compõem da forma simples ao lado}] \end{cases}$$

[BALL. 3.2] 45b

- Podemos então escrever a transformação *infinitesimal* ($s \to 0$):

$$U(s) = \mathbb{1} + \left.\frac{dU}{ds}\right|_{s=0} \cdot s + O(s^2)$$

- Quero que $UU^\dagger = \mathbb{1} \Rightarrow$

$$U^\dagger = \mathbb{1} + \left.\frac{dU^\dagger}{ds}\right|_{s=0} s + O(s^2) \Rightarrow UU^\dagger = \mathbb{1} + s\left[\frac{dU}{ds} + \frac{dU^\dagger}{ds}\right]_{s=0} + O(s^2) = \mathbb{1}$$

$$\Rightarrow \left.\left(\frac{dU}{ds} + \frac{dU^\dagger}{ds}\right)\right|_{s=0} = 0$$

Isso será verdade se $\boxed{\left.\frac{dU}{ds}\right|_{s=0} = iK}$ (✱), com $K = K^\dagger$ (Hermitiano).

- O operador K é chamado de <u>gerador</u> dessa família de operadores unitários. O nome "gerador" vem do fato de K determinar $U(s)$ p/ $s \to 0$ <u>e também</u> p/ qualquer valor de s. Veja:

$$U(s_1+s_2) = U(s_1)U(s_2) \quad [\text{derivo em relação a } s_2:]$$

$$\underbrace{\left.\frac{dU(s_1+s_2)}{ds_2}\right|_{s_2=0}}_{\left.\frac{dU(s)}{ds}\right|_{s=s_1}} = U(s_1)\underbrace{\left.\frac{dU(s_2)}{ds_2}\right|_{s_2=0}}_{\text{Uso (✱) } = iK} \Rightarrow \left.\frac{dU(s)}{ds}\right|_{s=s_1} = U(s_1)\, iK$$

$$\Rightarrow \int_{U(0)}^{U(s)} \frac{dU}{U} = \int_0^s iK\, ds' \Rightarrow \ln\left(\frac{U(s)}{\underbrace{U(0)}_{=\mathbb{1}}}\right) = iKs \Rightarrow \boxed{U(s) = \exp(iKs)}$$

OP. TRANSLAÇÃO DE S

PROVANDO AS PROPRIEDADES DE $\mathcal{T}(d\vec{x}')$:

I) Unitariedade:

$$\mathcal{T}^{+}(d\vec{x}')\mathcal{T}(d\vec{x}') = (1 + i K^{+}\cdot d\vec{x}')(1 - i\vec{K}\cdot d\vec{x}')$$

$$= \mathbb{1} - i\underbrace{(K-K^{+})}_{=0}\cdot d\vec{x}' + \cancel{O[(d\vec{x}')^2]}$$ o ignoramos termos de 2ª ordem em $d\vec{x}'$.

$$\simeq \mathbb{1}$$

II) Composição: $\mathcal{T}(d\vec{x}'')\mathcal{T}(d\vec{x}') = (1 - i\vec{K}\cdot d\vec{x}'')(1 - i\vec{K}\cdot d\vec{x}')$

$$\simeq \mathbb{1} - i\vec{K}\cdot(d\vec{x}' + d\vec{x}'')$$

$$= \mathcal{T}(d\vec{x}' + d\vec{x}'')$$

III) Inverso: $\mathcal{T}(-d\vec{x}') = \mathbb{1} + i\vec{K}\cdot d\vec{x}' = \mathcal{T}^{+}(d\vec{x}') = \mathcal{T}^{-1}(d\vec{x}')$.

IV) $\lim_{d\vec{x}'\to 0} \mathcal{T}(d\vec{x}') = \mathbb{1}$.

- $\mathcal{T}$ tem então as propriedades desejadas. Vamos agora descobrir a relação de $\mathcal{T}$ com o op. $\vec{x}$.

$[\vec{x}, \mathcal{T}(d\vec{x}')] = ?$ $\qquad \vec{x}\,\mathcal{T}(d\vec{x}')|\vec{x}'\rangle = \vec{x}|\vec{x}'+d\vec{x}'\rangle$

$$= (\vec{x}' + d\vec{x}')|\vec{x}'+d\vec{x}'\rangle$$

$$\mathcal{T}(d\vec{x}')\vec{x}|\vec{x}'\rangle = \vec{x}'\mathcal{T}(d\vec{x}')|\vec{x}'\rangle = \vec{x}'|\vec{x}'+d\vec{x}'\rangle$$

$$\Rightarrow [\vec{x}, \mathcal{T}(d\vec{x}')] = d\vec{x}'|\vec{x}'+d\vec{x}'\rangle \simeq d\vec{x}'|\vec{x}'\rangle$$ (com erro desprezado de 2ª ordem em $d\vec{x}'$)

- Como $\{|\vec{x}'\rangle\}$ é base completa

$$\Rightarrow [\vec{x}, \mathcal{T}(d\vec{x}')] = d\vec{x}'$$

Como $\mathcal{T}(d\vec{x}') = 1 - i\vec{K}\cdot d\vec{x}'$

$$\Rightarrow \boxed{-i\vec{x}(\vec{K}\cdot d\vec{x}') + i(\vec{K}\cdot d\vec{x}')\vec{x} = d\vec{x}'} \quad \left[\cdot \frac{1}{dx'}\right]$$

• Escolho $d\vec{x}'$ na direção $\hat{x}_j$:

$$-i\vec{x}K_j + iK_j\vec{x} = \hat{x}_j \quad [\cdot \hat{x}_i]$$

• Tomando o componente $\hat{x}_i$:

$$-ix_iK_j + iK_jx_i = \delta_{ij} \quad [\cdot i]$$

$$x_iK_j - K_jx_i = i\delta_{ij}$$

$$\Rightarrow \boxed{[x_i, K_j] = i\delta_{ij}}$$

• Esta é a relação de comutação entre x, y, z e K_x, K_y, K_z que aparecem no op. de translação infinitesimal.

• <u>Qual é o significado físico de $\vec{K}$?</u>

• Em mecânica, uma translação infinitesimal é uma transf. canônica $\vec{x}' = \vec{x} + d\vec{x}$ $\quad \vec{p}' = \vec{p}$

obtida da função geradora $F(\vec{x}, \vec{P}) = \vec{x}\cdot\vec{P}' + \vec{p}\cdot d\vec{x}$

• $\vec{x}\cdot\vec{P}'$ é a função geradora da identidade

$$\Rightarrow \mathcal{T}(d\vec{x}') = 1 - i\vec{K}\cdot d\vec{x}$$

$\vec{K}$ deve ter a ver com o <u>momento</u> $\vec{p}$.

- $\vec{K}$ não pode ser o momento: $\vec{K}$ tem dim de comprimento^{-1}
  ($\vec{K}\cdot d\vec{x}$ é adimensional)

- Essa relação com a mec. clássica nos faz identificar

$$\vec{K} = \frac{\vec{p}}{(\text{cte c/ dim. de ação})}$$ → aparece naturalmente na MQ
$= \hbar$

$$\boxed{\mathcal{T}(d\vec{x}') = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot d\vec{x}'}$$ onde $\vec{p}$ é o operador momento

$\Rightarrow \boxed{[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}}$ → Relação fundamental de comutação entre x e p.

Logo, x e p_x, y e p_y, z e p_z são pares de observáveis incompatíveis.

- Podemos aplicar o princípio de incerteza para esses pares:

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2$$

Como $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$ é proporcional à identidade, o princípio de incerteza p/ x_i, p_i é indep. do estado:

$$\langle(\Delta p)^2\rangle\langle(\Delta x)^2\rangle \geq \frac{1}{4}\hbar^2 \Rightarrow \langle\Delta p\rangle\langle\Delta x\rangle \geq \frac{\hbar}{2}$$

TRANSLAÇÕES FINITAS

- = composição de translações infinitesimais.
- Translação de $\Delta x'$ na direção $\hat{x}$:

$$\mathcal{T}(\Delta x' \hat{x}) |\vec{x}'\rangle = |\vec{x}' + \Delta x' \hat{x}\rangle$$

- compomos N translações infinitesimais, cada uma caracterizada por deslocamento $\frac{\Delta x'}{N}$, no limite $N \to \infty$:

$$\mathcal{T}(\Delta x' \hat{x}) = \lim_{N\to\infty} \left(1 - \frac{i p_x \Delta x'}{N \hbar}\right)^N = \exp\left(-\frac{i p_x \Delta x'}{\hbar}\right)$$

[VER PRÓX. PÁGINA]

- A exp. é uma <u>função do op. p_x</u>, definida pela série de potências:

$$\exp(\hat{X}) \equiv 1 + \hat{X} + \frac{\hat{X}^2}{2!} + \dots$$

- Propriedade importante de translações: elas comutam. Matematicamente:

$$\mathcal{T}(\Delta y' \hat{y}) \mathcal{T}(\Delta x' \hat{x}) = \mathcal{T}(\Delta x' \hat{x} + \Delta y' \hat{y})$$
$$\mathcal{T}(\Delta x' \hat{x}) \mathcal{T}(\Delta y' \hat{y}) = \mathcal{T}(\Delta x' \hat{x} + \Delta y' \hat{y})$$

[Rotações em torno de eixos diferentes, por exemplo, <u>não</u> comutam]

$$[\mathcal{T}(\Delta y' \hat{y}), \mathcal{T}(\Delta x' \hat{x})] = \left[\left(1 - \frac{i p_y \Delta y'}{\hbar} - \frac{p_y^2 (\Delta y')^2}{2\hbar^2} + \dots\right), 1 - \frac{i p_x \Delta x'}{\hbar} - \frac{p_x^2 (\Delta x')^2}{2\hbar^2} + \dots\right]$$

$$\simeq -\frac{(\Delta x')(\Delta y') [p_y, p_x]}{\hbar^2} = 0$$

até 2ª ordem em $\Delta x', \Delta y'$. $\Rightarrow [p_x, p_y] = 0$, ou de forma + geral,

$$\boxed{[p_i, p_j] = 0}$$

= Consequência da <u>comutação de translações</u> nas direções p_i, p_j.

↳ formam um grupo Abeliano (comutativo).

$$\lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{x}{n}\right)^n = \ ?$$

$$\left(1+\frac{x}{}\right)^n \overset{\text{TAYLOR}}{=} 1 + nx + \frac{n(n-1)}{2!}x^2 + \frac{n(n-1)(n-2)}{3!}x^3 + \cdots$$

$$\left(1+\frac{x}{n}\right)^n = 1 + x + \frac{n(n-1)}{2!}\frac{x^2}{n^2} + \frac{n(n-1)(n-2)}{3!}\frac{x^3}{n^3} + \cdots$$

• Tirando o limite, termo a termo:

$$\lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{x}{n}\right)^n = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots = \underline{\underline{\exp(x)}}$$

CQD

[Parênteses matemáticos]

Teoria de grupos

- Um grupo é um conj. de elementos $\{x, y, \ldots, z\}$ e uma operação binária (denotada por $x \cdot y$) (que leva dois elementos em um terceiro) com as propriedades:

1. (Fechamento) $\forall\, x, y \in G : \; x \cdot y = z \in G$
2. (Elemento unitário) $\exists\, 1 \in G : \forall\, x \in G : \; x \cdot 1 = x$
3. (Inversos) $\forall\, x \in G : \exists\, x^{-1} \in G : \; x^{-1} \cdot x = x \cdot x^{-1} = 1$
4. (Associatividade) $\forall\, x, y, z \in G : \; x \cdot (y \cdot z) = (x \cdot y) \cdot z$

Exemplos:

ⓐ $\mathbb{N}^* =$ inteiros, tirando o zero. Operação: MULTIPLICAÇÃO. } DISCRETO INFINITO

ⓑ $\mathbb{N}$, op. soma. } Discreto, infinito.

ⓒ Rotações em torno de eixos arbitrários. Op: composição de rotações. } contínuo infinito

Subgrupo: rotação em eixo fixo: Abeliano.

ⓓ $\{-1, 1\}$, op: multiplicação. } Discreto, finito.

$\Rightarrow p_x, p_y, p_z$ são observáveis compatíveis.

- Auto-estados simultâneos $|\vec{p}\,'\rangle \equiv |p_x', p_y', p_z'\rangle$

$$p_x|\vec{p}\,'\rangle = p_x'|\vec{p}\,'\rangle$$
$$p_y|\vec{p}\,'\rangle = p_y'|\vec{p}\,'\rangle$$
$$p_z|\vec{p}\,'\rangle = p_z'|\vec{p}\,'\rangle$$

- Ação da translação $\mathcal{T}(d\vec{x}\,')$ nos auto-estados $|\vec{p}\,'\rangle$:

$$\mathcal{T}(d\vec{x}\,')|\vec{p}\,'\rangle = \left(1 - \frac{i\vec{p}\cdot d\vec{x}\,'}{\hbar}\right)|\vec{p}\,'\rangle = \left(1 - \frac{i\vec{p}\,'\cdot d\vec{x}\,'}{\hbar}\right)|\vec{p}\,'\rangle$$

$\Rightarrow |\vec{p}\,'\rangle$ é auto-est. de $\mathcal{T}(d\vec{x}\,')$ [o que não é verdade p/ $|\vec{x}\,'\rangle$].

- Isso podia ser antecipado, pois $[\vec{p}, \mathcal{T}(d\vec{x}\,')] = 0$

[Reparem também que autovalor é complexo $\Rightarrow \mathcal{T}(d\vec{x}\,')$ é unitário mas não é Hermitiano]

As relações de comutação canônicas

- Resumo do que descobrimos estudando translações:

$$[x_i, x_j] = 0 = [p_i, p_j] \qquad [x_i, p_j] = i\hbar\,\delta_{ij}$$

- Descobertas em 1925 por Heisenberg – e ele não conhecia matrizes!

- Dirac (também em 1925) as encontrou seguindo uma analogia com a mecânica clássica. Lá definimos os parênteses de Poisson

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

- Por exemplo: $[x_i, p_j]_{class} = \delta_{ij}$

- Dirac estipulou a regra: $[\ ,\ ]_{class} \rightarrow \dfrac{[\ ,\ ]}{i\hbar}$

- $[\ ,\ ]_{class}$ e $[\ ,\ ]$ têm várias propriedades em comum, o que possibilita identificação dos op. que representam observáveis em MQ.

Função de onda no espaço das posições

[SAK 1.7]

- Vamos começar discutindo uma partícula na reta 1D.
- Base: $\{|x'\rangle\}$ tais que $X|x'\rangle = x'|x'\rangle$
- Normalização p/ caso contínuo: $\langle x''|x'\rangle = \delta(x''-x')$ ← Dirac
- Expansão de ket genérico: $|\alpha\rangle \overset{=\mathbb{1}|\alpha\rangle}{=} \int dx' |x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle$
  - o coeficiente $\langle x'|\alpha\rangle$ é tal que $|\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx'$ é a probabilidade de encontrarmos a part. a uma dist. dx' em torno de x'.
  - $\langle x'|\alpha\rangle = \psi_\alpha(x')$ = <u>função de onda</u> da partícula.
- Produto interno $\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\beta|\mathbb{1}|\alpha\rangle =$

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

⇒ caracteriza o "overlap" das duas f.c.s de onda.

- Pelos nossos postulados, $\langle\beta|\alpha\rangle$ é a amplitude de probabilidade do estado $|\alpha\rangle$ ser encontrado no est. $|\beta\rangle$.

- Interpretando $|\alpha\rangle = \sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\alpha\rangle$ usando funções de onda:

$[\cdot\langle x'|]$ $\Rightarrow \langle x'|\alpha\rangle = \sum_i \langle x'|a_i\rangle\langle a_i|\alpha\rangle$

$$= \sum_i \langle a_i|\alpha\rangle\langle x'|a_i\rangle$$

$\Rightarrow \psi_\alpha(x') = \sum_i c_i\, u_i(x')$ com

$$\begin{cases} u_i(x') = \langle x'|a_i\rangle \\ \quad = \text{autofunção do operador } A \\ c_i = \text{coeficiente da expansão de } \psi_\alpha(x') \\ \quad \text{na base das autofunções de } A \\ \quad \{u_i(x')\} \end{cases}$$

- Agora elemento de matriz de A:

$$\langle\beta|A|\alpha\rangle = \int dx' \int dx'' \langle\beta|x'\rangle\langle x'|A|x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle$$

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

$\Rightarrow$ P/ avaliar $\langle\beta|A|\alpha\rangle$ precisamos conhecer $\langle x'|A|x''\rangle$, que é uma função das duas variáveis x', x''.

- Fica + simples se o observável A é função do operador x.

- Por exemplo, consideremos $A = x^2$, como aparece na Hamiltoniana do oscilador Harmônico:

$$\langle x'|\underbrace{x^2|x''\rangle}_{x''^2|x''\rangle} = x''^2 \underbrace{\langle x'|x''\rangle}_{=\delta(x'-x'')}$$

Alternativamente:

$$\underbrace{\langle x'|x^2}_{= x'^2\langle x'|}|x''\rangle = x'^2\langle x'|x''\rangle = x'^2\,\delta(x'-x'')$$

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

$\rightarrow$ se torna integral simples (era dupla)

- Para observáveis $f(x)$ mais gerais:

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

Note que: $f(x)$ — operador; $f(x')$ — função

O operador momento na base de posições

- Vamos obter a representação do op. $\hat{p}$ na base de auto-estados da posição, que temos usado até agora.
- Começamos pela definição do momento como gerador das translações:

$$\left(1 - \frac{i p \Delta x'}{\hbar}\right)|\alpha\rangle = \int dx' \, \mathcal{T}(\Delta x') |x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \int dx' |x'+\Delta x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle$$

[mudança de variável de integração]

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

- Comparando os 2 lados acima:

$$p|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle\right) \qquad [\cdot \langle x'|]$$

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

- Para saber os elementos de matriz de $\hat{p}$, use $|\alpha\rangle = |x''\rangle$:

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

- Uma identidade importante:

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

- É fácil mostrar que:

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

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

Funç de onda no espaço dos momentos

- Vamos discutir como trabalhar com a base de auto-estados do op. momento. Por simplicidade, continuaremos no caso 1D.
- Base: $$p|p'\rangle = p'|p'\rangle \quad \text{com} \quad \langle p'|p''\rangle = \delta(p'-p'')$$
- $|\alpha\rangle$ arbitrário: $$|\alpha\rangle = \int dp'\, |p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle$$
  - $|\langle p'|\alpha\rangle|^2 dp'$ = prob. de medirmos $\hat{p}$ e obtermos valor ao torno de p' (intervalo dp')
  - $\langle p'|\alpha\rangle$ é o que chamamos de funç de onda no espaço dos momentos. Vamos usar a notaç: $$\langle p'|\alpha\rangle = \phi_\alpha(p')$$
- Se $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1 \Rightarrow \int dp' \langle\alpha|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle = \int dp'\, |\phi_\alpha(p')|^2 = 1$.

+ Como as bases $\{|x'\rangle\}$ e $\{|p'\rangle\}$ se relacionam?

- No caso discreto, tínhamos $\langle a_i|U|a_j\rangle = \langle a_i|b_j\rangle$. Agora vamos precisar de $\langle x'|p'\rangle = \underbrace{\text{funç de transformaç}}_{\text{[é funç de } x' \text{ e } p'\text{]}}$ da represent. $\hat{x}$ p/ $\hat{p}$.
- Começamos com elemento de matriz de $\hat{p}$:

$$\langle x'|p|\alpha\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle \quad [\text{faço } |\alpha\rangle = p']$$

$$\Rightarrow \langle x'|\underbrace{p|p'\rangle}_{p'|p'\rangle} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|p'\rangle \quad \Rightarrow \boxed{p'\langle x'|p'\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|p'\rangle}$$

- É eq. diferencial p/ funç $\langle x'|p'\rangle$. $\Rightarrow \boxed{\langle x'|p'\rangle = N \exp\left(\frac{i p' x'}{\hbar}\right)}$

N: cte de normalizaç [já vamos encontrá-la]

• Encarando $\langle x'|p'\rangle = N\exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right)$ como função de x' (com p' fixo), esta é a amplitude de probabilidade de auto-st. c/ momento p' ser encontrado na pos. x' = onda plana.

Lembrando:

$\delta(x) = \int \exp(2\pi i x p)\, dp$

• Encontrando a cte de normalização N:

$$\underbrace{\langle x'|\hat{\mathbb{1}}|x''\rangle}\ = \int dp' \langle x'|p'\rangle\langle p'|x''\rangle$$

$$\delta(x'-x'') = |N|^2 \underbrace{\int dp' \exp\left[\frac{ip'(x'-x'')}{\hbar}\right]}_{2\pi\hbar\,\delta(x'-x'')}$$

• Escolhendo N real e positivo (convenção)

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

• Vamos agora relacionar as ~~[illegible]~~ $\psi(x')$ e $\phi(p')$.

$$\underbrace{\langle x'|\alpha\rangle}_{\psi_\alpha(x')} = \int dp' \langle x'|p'\rangle \underbrace{\langle p'|\alpha\rangle}_{\phi_\alpha(p')}$$

$$\underbrace{\langle p'|\alpha\rangle}_{\phi_\alpha(p')} = \int dx' \langle p'|x'\rangle \underbrace{\langle x'|\alpha\rangle}_{\psi_\alpha(x')}$$

$$\Rightarrow \psi_\alpha(x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp' \exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right) \phi_\alpha(p')$$

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

Reparem que $\phi_\alpha(p')$ é a transf. de Fourier de $\psi_\alpha(x')$.

EXEMPLO: Pacotes de onda Gaussianos

$$\psi_\alpha(x') = \langle x'|\alpha\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{d}} \exp\left[ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}\right]$$

- É onda plana modulada por perfil Gaussiano centrado na origem.
- Densidade de prob. (p/ medidas de $\hat{x}'$) $= |\langle x'|\alpha\rangle|^2$ tem perfil Gaussiano com largura d.
- Vamos calcular $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$, $\langle p\rangle$, $\langle p^2\rangle$.

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle\alpha|x'\rangle x' \langle x'|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' |\langle x'|\alpha\rangle|^2 x' = 0 \quad \text{(por simetria)}$$

$$\langle x^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' x'^2 |\langle x'|\alpha\rangle|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}d}\int_{-\infty}^{+\infty} dx' x'^2 \exp\left[\frac{-x'^2}{d^2}\right] = \frac{d^2}{2}$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle(\Delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = \frac{d^2}{2}} \leftarrow \text{variância de } \hat{x}.$$

Exercício: Mostre que $\langle p\rangle = \hbar k$

$$\langle p^2\rangle = \frac{\hbar^2}{2d^2} + \hbar^2 k^2$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle(\Delta p)^2\rangle = \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{2d^2}}$$

$$\Rightarrow \langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4}$$

$\leftarrow$ Pacotes Gaussianos são pacotes de incerteza mínima $\Leftrightarrow$ saturam a desigualdade do Princípio da Incerteza. (e independentemente da largura d)

- Vamos encontrar ~~a função de~~ $\phi_\alpha(p')$: [COMPLETANDO O QUADRADO]

$$\phi_\alpha(p') = \langle p'|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{d}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \exp\left(-\frac{ip'x'}{\hbar} + ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}\right)$$

$$= \sqrt{\frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}}} \exp\left[-\frac{(p'-\hbar k)^2 d^2}{2\hbar^2}\right]$$

- $|\langle p'|\alpha\rangle|^2$ = prob de medir $\hat{p}$ e obter p' é Gaussiana, centrada em $\hbar k$
- largura inversamente proporcional à de $\psi_\alpha(x')$.
- Se $d \to \infty$ $\Rightarrow$ $\begin{cases} \psi_\alpha(x) \text{ é onda plana} \Rightarrow |\langle x'|\alpha\rangle|^2 \text{ é CTE.} \\ \phi_\alpha(p') \text{ é função } \delta \text{ com pico em } \hbar k. \end{cases}$
- Se $d \to 0$ $\Rightarrow$ o inverso.

Generalização p/ 3 dimensões

- É fácil.

$$\begin{cases} \text{Base } \{|\vec{x}'\rangle\} & \vec{X}|\vec{x}'\rangle = \vec{x}'|\vec{x}'\rangle \quad ; \quad \langle\vec{x}'|\vec{x}''\rangle = \delta^3(\vec{x}'-\vec{x}'') \\ \text{Base } \{|\vec{p}'\rangle\} & \vec{p}|\vec{p}'\rangle = \vec{p}'|\vec{p}'\rangle \quad ; \quad \langle\vec{p}'|\vec{p}''\rangle = \delta^3(\vec{p}'-\vec{p}'') \end{cases}$$

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

- Completeza: $\int d^3x'\,|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'| = \mathbb{1} = \int d^3p'\,|\vec{p}'\rangle\langle\vec{p}'|$

- $|\alpha\rangle$ arbitrário: $|\alpha\rangle = \int d^3x'\,|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\alpha\rangle = \int d^3p'\,|\vec{p}'\rangle\langle\vec{p}'|\alpha\rangle$

- $\langle\vec{x}'|\alpha\rangle = \psi_\alpha(\vec{x}')$ = fç. de onda no espaço das posições.

  $\langle\vec{p}'|\alpha\rangle = \phi_\alpha(\vec{p}')$ = " momentos.

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

- Função de transformação: $\langle\vec{x}'|\vec{p}'\rangle = \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\right]\exp\left(\frac{i\,\vec{p}'\cdot\vec{x}'}{\hbar}\right)$

$$\Rightarrow \psi_\alpha(\vec{x}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int d^3p'\,\exp\left(\frac{i\,\vec{p}'\cdot\vec{x}'}{\hbar}\right)\phi_\alpha(\vec{p}')$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int d^3x'\,\exp\left(\frac{-i\,\vec{p}'\cdot\vec{x}'}{\hbar}\right)\psi_\alpha(\vec{x}')$$

- Qual é a dimensão física de $\underbrace{\psi_\alpha(\vec{x}')}_{3D}$ e $\underbrace{\psi_\alpha(x')}_{1D}$?