MECÂNICA QUÂNTICA – AULA 8 – Observáveis Contínuos

O formalismo matemático que desenvolvemos nas últimas aulas para descrever os fenômenos da MQ, como codificado nos axiomas 1-5, é muito mais poderoso e geral do que a análise do spin do elétron de valência de um átomo de prata no contexto do experimento de Stern-Gerlach permite ilustrar. De fato tal sistema é descrito por um espaço de estados com dimensão finita, a saber, bidimensional. Conseqüentemente, apenas um número finito de valores são experimentalmente acessíveis, ou seja, lidamos apenas com observáveis com espectro discreto.

Por outro lado, existem observáveis bem mais complicados que podem exibir valores experimentais que sequer são enumeráveis. Por exemplo, considere uma partícula livre em movimento unidimensional. Esperamos, a partir de nossa intuição clássica, que o momento e a posição (ao longo do eixo $\hat{a}_x$) constituam observáveis relevantes para a descrição quântica deste sistema. Contudo, a coordenada x de uma partícula, diferentemente do spin de um elétron, pode assumir uma infinidade não enumerável de valores experimentais. Em outras palavras, o espectro do observável posição, além de ser um conjunto com infinitos elementos, é contínuo. A primeira conseqüência desse fato é que necessitamos de um espaço de estados com dimensão infinita para descrever apropriadamente o sistema.

Nesta aula mostraremos como empregar o formalismo matemático subjacente aos axiomas 1-5 na descrição de observáveis contínuos, que definimos como aqueles que possuem um espectro contínuo. Nosso primeiro objetivo consiste, pois, em mostrar como tais observáveis são descritos no contexto dos espaços de Hilbert.

8.1 - Espaços Vetoriais de Funções

Introduzimos na definição 3.11 o conceito abstrato de espaço vetorial, e nele nenhuma distinção foi feita quanto à natureza de seus elementos, desde que as oito propriedades enumeradas no corpo da definição (conhecidas como axiomas de espaço vetorial) fossem satisfeitas. Até o dado momento nos contentamos com os espaços vetoriais constituídos por ênuplas de números complexos, i.e., $\mathbb{C}^n$, $n \in \mathbb{N}$. Contudo, como qualquer observável $A : \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^n$, autoadjunto, é necessariamente representado por uma matriz de $Mat(n \times n, \mathbb{C})$, sabemos que seu espectro, $\sigma(A)$, coincide com o o conjunto dos seus autovalores. Portanto, $\sigma(A)$ é forçosamente discreto. Logo, para descrevermos observáveis contínuos, precisamos utilizar objetos mais complicados do que ênuplas de números complexos como os elementos de nosso espaço vetorial.

Consideremos inicialmente o conjunto das funções contínuas de uma variável real restritas a um intervalo fechado da reta real a valores complexos, i.e.,

$$\mathcal{C}^0([a,b]) = \{ f : [a,b] \subset \mathbb{R} \to \mathbb{C} \text{, contínuas, } a < b \}.$$

Notando que sobre $\mathcal{C}^0([a,b])$ podemos definir as operações:

(i) Soma: "$+$" : $\mathcal{C}^0([a,b]) \times \mathcal{C}^0([a,b]) \to \mathcal{C}^0([a,b])$,

$$(f(x), g(x)) \mapsto f(x) + g(x), \quad \forall x \in [a,b],$$

(ii) Multiplicação por escalar: "$\cdot$" : $\mathbb{C} \times \mathcal{C}^0([a,b]) \to \mathcal{C}^0([a,b])$,

$$(\alpha, f(x)) \mapsto \alpha f(x), \quad \forall x \in [a,b],$$

é fácil constatar que a tripla $\{\mathcal{C}^0([a,b]), +, \cdot\}$ constitui um espaço vetorial.

Exercício 8.1: "Verifique, de acordo com a definição 3.11, que a tripla $\{\mathcal{C}^0([a,b]), +, \cdot\}$ definida acima, de fato, constitui um espaço vetorial."

Verificaremos posteriormente que tal espaço vetorial, de fato, apresenta dimensão infinita.

Estudemos, entretanto, primeiramente o espaço vetorial dual a $\mathcal{C}^0([a,b])$, i.e,

$$\mathcal{C}^0([a,b])' = \{ \ell : \mathcal{C}^0([a,b]) \to \mathbb{C} \text{, linear} \}.$$

Sejam $g, p \in \mathcal{C}^0([a,b])$ com p estritamente positiva em $[a,b]$ e defina

$$\ell[f] = \int_a^b dx\, p(x)\, \bar{g}(x)\, f(x).$$

Como o produto de funções contínuas consiste uma função contínua, e funções contínuas são integráveis em qualquer intervalo fechado, podemos concluir que a integral acima está bem definida. Usando adicionalmente a linearidade da integral, demonstramos que tal $\ell \in \mathcal{C}^0([a,b])'$. Dada a arbitrariedade da função $g \in \mathcal{C}^0([a,b])$ empregada na construção acima, acabamos de exibir uma aplicação injetora entre $\mathcal{C}^0([a,b])$ e $\mathcal{C}^0([a,b])'$:

$$\mathcal{C}^0([a,b]) \ni g \xleftrightarrow{C.D.} \ell_g[f] = \int_a^b dx\, p(x)\, \bar{g}(x)\, f(x).$$

Com isso podemos proceder como na seção 3.6 e introduzir um produto interno em $\mathcal{C}^0([a,b])$, a saber,

$$\langle \_, \_ \rangle_p : \mathcal{C}^0([a,b]) \times \mathcal{C}^0([a,b]) \longrightarrow \mathbb{C}$$

$$(g, f) \longmapsto \langle g, f \rangle_p = \int_a^b dx\, p(x)\, \bar{g}(x)\, f(x) \qquad (*)$$

Exercício 8.2: "Demonstre que $(*)$ define um produto interno de acordo com a definição 3.19."

É possível demonstrar então que o espaço vetorial $\mathcal{C}^0([a,b])$ constitui um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ com respeito ao produto interno definido por $(*)$. Adicionalmente, qualquer família de polinômios ortogonais com respeito a $(*)$, i.e.,

$p_n : [a,b] \to \mathbb{C}$, polinômio de grau $n \in \mathbb{N}$, tal que $\langle p_n, p_m \rangle_p = \delta_{nm}$, como, por exemplo, os polinômios de Legendre e Tchebychev, para citar apenas duas famílias, constitui um conjunto ortonormal completo em $\mathcal{H}$. De forma que, $\forall g \in \mathcal{C}^0([a,b])$ vale

$$g(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \langle p_n, g\rangle_p \, p_n(x) \qquad \text{e} \qquad \|g\|_p^2 = \sum_{n=0}^{\infty} |\langle p_n, g\rangle_p|^2$$

onde $\|g\|_p = \langle g, g\rangle_p^{1/2}$ é a norma induzida por $(*)$ em $\mathcal{H}$. Naturalmente, a convergência das séries acima se dá com respeito à norma $\|\cdot\|_p$ de $\mathcal{H}$, ou seja,

$$\lim_{N\to\infty} \| g - \sum_{n=0}^{N} \langle p_n, g\rangle p_n(x) \|_p .$$

Finalmente, notando que uma tal família de polinômios ortonormais possui infinitos membros, um para cada $n \in \mathbb{N}$, podemos concluir que o espaço de Hilbert em consideração possui dimensão infinita. De uma maneira geral, espaços de Hilbert cujos elementos são funções são infinitodimensionais, ademais suas bases ortonormais não precisam sequer ser contáveis como no exemplo considerado acima. Novamente, a existência de tais conjuntos ortonormais completos para qualquer espaço de Hilbert é uma conseqüência do lema de Zorn. Notamos, contudo, que no caso de espaços de Hilbert dotados de bases não-contáveis, qualquer vetor pode ser obtido como um limite de seqüências de vetores obtidos a partir de combinações lineares finitas de elementos da base.

8.2 – Operadores Lineares Autoadjuntos

Naturalmente, obter o espaço de estados de um sistema constitui apenas a primeira etapa na formulação matemática do sistema em estudo, a próxima etapa consiste em obter a descrição de seus observáveis relevantes. Novamente, o teorema espectral assume um papel central na discussão ao viabilizar a interpretação probabilística inerente à MQ. É no contexto de espaços de Hilbert com dimensão infinita que a hipótese de autoadjunticidade do operador linear no teorema espectral mostra toda a sua não-trivialidade. De fato, a definição 5.10 nos diz que para que um operador linear $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ seja autoadjunto duas condições precisam ser satisfeitas:

(i) $D(A^*) = D(A)$;

(ii) $\langle A\varphi, \psi \rangle = \langle \varphi, A\psi \rangle, \ \forall \varphi, \psi \in \mathcal{H}$.

Para o caso finito dimensional, em virtude do isomorfismo entre o espaço dos operadores lineares e das matrizes quadradas de dimensão apropriada, a primeira condição é trivialmente satisfeita, pois, $D(A) = \mathcal{H} = D(A^*), \ \forall A \in Mat(n \times n, \mathbb{C})$. De forma que nos preocupávamos apenas com a segunda condição, também conhecida como hermiticidade. Contudo, para espaços de Hilbert com dimensão infinita, não temos mais a primeira condição garantida a priori, e como veremos posteriormente, satisfazê-la pode ser uma tarefa deveras não-trivial e com possíveis implicações físicas.

O maior cuidado necessário à definição do domínio de um operador inirente ao caso infinito dimensional, requer uma análise mais detalhada que, em geral, envolve particularidades do espaço de Hilbert em questão. Portanto, nessa consideração inicial vamos supor indiscriminadamente que a condição (i) da definição 5.10 é satisfeita para um operador $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ arbitrário. Neste caso, o teorema 5.13 (espectral) afirma que

$$A = \int_{\sigma(A)} \lambda \, d\Pi_\lambda ,$$

onde $\Pi_\lambda : D(A) \to D(A)$ é um projetor ortogonal e $\sigma(A) \subseteq \mathbb{R}$ é, em geral, um subconjunto contínuo, não necessariamente próprio da reta real. Conseqüentemente,

$$\int_{\sigma(A)} d\Pi_\lambda = \mathbb{1},$$

constitui uma decomposição da identidade, e $\forall \psi \in D(A)$ não-nulo:

$$\langle \psi, A\psi \rangle = \int_{\sigma(A)} \lambda \, d\langle \psi, \Pi_\lambda \psi \rangle,$$

como a medida $d\langle \psi, \Pi_\lambda \psi \rangle$ é positiva em $\sigma(A)$, se $\|\psi\|^2 = 1$, temos que:

$$\int_{\sigma(A)} d\langle \psi, \Pi_\lambda \psi \rangle = 1,$$

indicando que $d\langle \psi, \Pi_\lambda \psi \rangle$ é uma medida de probabilidade. Logo, no axioma 3, precisamos apenas substituir as somas sobre os elementos do espectro por integrais com respeito à medida $d\langle \psi, \Pi_\lambda \psi \rangle$ sobre $\lambda \in \sigma(A)$ e as distribuições de probabilidade P_λ por densidades de probabilidade $dP_\lambda = d\langle \psi, \Pi_\lambda \psi \rangle$.

8.3 - A Posição de uma Partícula na MQ

As considerações feitas na seção anterior sugerem que para entendermos adequadamente o comportamento de observáveis contínuos, devemos nos concentrar em algum exemplo específico. Nesta seção começaremos, pois, a análise do processo de medição da posição de uma partícula. Por simplicidade, consideramos inicialmente uma partícula com o movimento restrito a uma única dimensão. Dessa forma precisamos de apenas um número (coordenada ao longo do eixo $\hat{O}x$) para caracterizar completamente a sua posição.

Seja $\mathcal{H}$ um espaço de Hilbert com dimensão infinita. Posteriormente, especificaremos $\mathcal{H}$ em maiores detalhes, contudo para nossa primeira análise, um tanto quanto heurística, é suficiente tomar $\mathcal{H}$ como um espaço de funções de uma variável real. Podemos definir em $\mathcal{H}$ um operador $Q : D(Q) \subseteq \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, cuja ação consiste em multiplicar uma função arbitrária $\psi(x) \in D(Q)$ por $x \in \mathbb{R}$, i.e.,

$$Q : \mathcal{H} \ni \psi(x) \longmapsto Q\psi(x) = x\psi(x).$$

Exercício 8.3: " Seja $D = \mathcal{C}^0([a,b])$ e considere o operador multiplicativo $Q : D \subseteq \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, $\varphi(x) \longmapsto x\varphi(x)$. Mostre que Q é linear e hermitiano."

De uma forma geral, a linearidade e a hermiticidade de Q independem da escolha de seu domínio de definição. Tal escolha, entretanto, é crucial para termos um operador autoadjunto. Contudo, tal problema é significativamente complicado, e por isso neste tratamento preliminar não o abordaremos diretamente. Posto de outra forma, no que se segue vamos supor que $\mathcal{D}(Q)$ foi previamente escolhido de sorte que $D(Q) = D(Q^*)$ é um subconjunto denso de $\mathcal{H}$.

Argumentamos a seguir que podemos utilizar tal operador Q para representar o observável posição. Denote por $|x'\rangle \in \mathcal{D}(Q)$ os autovetores generalizados de Q, ou seja, funções que satisfazem:

$$Q|x'\rangle = x'|x'\rangle,$$

onde $x' \in \sigma(Q) \subseteq \mathbb{R}$ possuem dimensão de comprimento. Como Q é autoadjunto por hipótese, dispomos da seguinte resolução da identidade:

$$\mathbb{1} = \int_{\sigma(Q)} d\Pi_{x'} = \int_{\mathbb{R}} dx' \, |x'\rangle\langle x'|.$$

De forma que um estado arbitrário $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ pode ser decomposto como:

$$|\alpha\rangle = \int_{\sigma(Q)} dx' \, |x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle.$$

Consideramos a seguir uma medição altamente idealizada da posição de uma partícula. Suponha que tenhamos um detector suficientemente pequeno que emita um sinal quando a partícula sob estudo esteja exatamente no ponto $x' \in \sigma(Q)$. Nestas condições, imediatamente após o detector sinalizar poderemos afirmar que o estado da partícula é representado por $|x'\rangle$. Em outras palavras, quando o detector sinaliza a presença da partícula no ponto x', o estado $|\alpha\rangle$ colapsa para $|x'\rangle$.

Naturalmente, na prática nossa precisão é limitada e, de uma forma geral, o melhor que podemos afirmar é que a partícula se encontra em alguma vizinhança do ponto x', $(x' - \Delta/2, x' + \Delta/2)$. Neste caso, quando o detector sinalizar, o estado $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ colapsa da seguinte forma:

$$|\alpha\rangle = \int_{\sigma(Q)} dx' \, |x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{Medição}} \int_{x'-\Delta/2}^{x'+\Delta/2} dx'' \, |x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle .$$

Supondo que $\langle x''|\alpha\rangle$ seja suficientemente constante na vizinhança $(x' - \Delta/2, x' + \Delta/2)$, temos que a probabilidade do detector sinalizar a presença da partícula é:

$$|\langle x''|\alpha\rangle|^2 \Delta ,$$

ou seja $|\langle x''|\alpha\rangle|^2$ representa uma densidade de probabilidade de detectarmos a partícula. Claramente, se $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ estiver normalizado,

$$1 = \langle\alpha|\alpha\rangle = \int_{\sigma(Q)} dx' \langle\alpha|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \int_{\sigma(Q)} dx' \, |\langle\alpha|x'\rangle|^2 .$$

O conceito de autoestado generalizado disutido acima pode ser facilmente estendido para o caso tridimensional. Neste caso supomos a existência de três observáveis compatíveis $Q_i : D \subseteq \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, $i = 1,2,3$ com D denso em $\mathcal{H}$, tais que:

$$Q_i \, |\mathbf{x}'\rangle = x'_i \, |\mathbf{x}'\rangle , \quad i = 1,2,3 , \quad x'_i \in \sigma(Q_i) \subseteq \mathbb{R}$$

onde

$$|\mathbf{x}'\rangle = |x'_1, x'_2, x'_3\rangle$$

é um autovetor generalizado simultâneo de Q_i, $i = 1,2,3$. Novamente, dispomos de uma resolução da identidade

$$\mathbb{1} = \int_{\sigma(Q_1)} dx'_1 \int_{\sigma(Q_2)} dx'_2 \int_{\sigma(Q_3)} dx'_3 \, |\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'| \equiv \int_{\sigma(\mathbf{Q})} d\mathbf{x}' \, |\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'| .$$

8.4 - Translações Espaciais

Abordamos nesta seção o problema de implementar o conceito de translação espacial na MQ. Como veremos tal construção é significativamente similar à empregada para a construção do operador de evolução temporal, que utilizamos na dedução da equação de Schrödinger.

Suponha que inicialmente a partícula em estudo se encontre em um estado bem definido do observável posição ao redor do ponto $\mathbf{x}' \in \mathbb{R}^3$. Considere, então uma operação que leve tal estado em outro estado bem definido do operador posição, só que desta vez nas vizinhanças do ponto $\mathbf{x}' + \mathbf{\Delta} \in \mathbb{R}^3$, sem alterar nenhuma outra propriedade do sistema, como por exemplo o spin da partícula. A operação que acabamos de introduzir define o operador de translação:

$$T : D \subseteq \mathcal{H} \longrightarrow D \subseteq \mathcal{H} \quad , \quad T(\mathbf{\Delta}) |\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}' + \mathbf{\Delta}\rangle,$$

onde $D \subseteq \mathcal{H}$ é o domínio dos operadores posição Q_i, $i = 1, 2, 3$ e $|\mathbf{x}'\rangle$ seus autovetores generalizados simultâneos, i.e.,

$$Q_i |\mathbf{x}'\rangle = x_i |\mathbf{x}'\rangle, \ i = 1, 2, 3,$$

similarmente,

$$Q_i |\mathbf{x}' + \mathbf{\Delta}\rangle = (x_i + \Delta_i) |\mathbf{x}' + \mathbf{\Delta}\rangle \ , \ i = 1, 2, 3.$$

Em virtude da discussão anterior, $\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ podemos escrever:

$$|\alpha\rangle = \int_{\sigma(D)} d\mathbf{x}' |\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle$$

$$\Rightarrow T(\mathbf{\Delta}) |\alpha\rangle = T(\mathbf{\Delta}) \int_{\sigma(D)} d\mathbf{x}' |\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle = \int_{\sigma(D)} d\mathbf{x}' \left(T(\mathbf{\Delta}) |\mathbf{x}'\rangle\right) \langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle$$

$$= \int_{\sigma(D)} d\mathbf{x}' |\mathbf{x}' + \mathbf{\Delta}\rangle\langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle$$

$$= \int_{\sigma(D)} d\mathbf{x}'' |\mathbf{x}''\rangle\langle\mathbf{x}'' - \mathbf{\Delta}|\alpha\rangle,$$

após uma simples mudança de variáveis, $\mathbf{x}'' = \mathbf{x}' + \mathbf{\Delta}$. Mostrando-nos o comportamento da função de onda sob translações espaciais:

$$\alpha(\mathbf{x}') = \langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle \longrightarrow \langle\mathbf{x}' - \mathbf{\Delta}|\alpha\rangle = \alpha(\mathbf{x}' - \mathbf{\Delta}).$$

Neste ponto devemos fazer um comentário simples, porém extremamente relevante sobre a abordagem que adotamos para implementar a translação espacial. Em nossa consideração anterior definimos o operador de translação espacial ao ativamente levarmos o sistema do ponto $\mathbb{x}' \in \mathbb{R}^3$ até o ponto $\mathbb{x}' + \mathbb{\Delta} \in \mathbb{R}^3$. Similarmente, poderíamos tê-lo definido deixando o sistema parado no ponto $\mathbb{x}' \in \mathbb{R}^3$ e considerando uma mudança do sistema de coordenadas correspondente a um deslocamento de sua origem por $-\mathbb{\Delta} \in \mathbb{R}^3$. Fisicamente, nesta segunda abordagem estamos interessados em obter a descrição do sistema do ponto de vista de um observador localizado no ponto $-\mathbb{\Delta} \in \mathbb{R}^3$ com respeito ao sistema de coordenadas do observador original. No jargão da física a primeira abordagem é denominada ativa, enquanto que a segunda é chamada de passiva. Claramente, tais abordagens são equivalentes, contudo, não devem ser misturadas. No que se segue empregaremos apenas a primeira abordagem.

Assim como no caso do operador de evolução temporal, veremos que imposições fisicamente razoáveis nos levarão a concluir que a translação espacial é implementada por um grupo de operadores unitários e contínuos.

1) Conservação da Informação: essa propriedade equivale à conservação da probabilidade, assim se o sistema se encontrar originalmente num estado normalizado $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$, o estado transladado $T(\mathbb{\Delta})|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ deve permanecer normalizado,

$$1 = \langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\alpha|T^*(\mathbb{\Delta})T(\mathbb{\Delta})|\alpha\rangle.$$

Tal propriedade é trivialmente satisfeita se o operador de translação espacial for unitário

$$T^*(\mathbb{\Delta})T(\mathbb{\Delta}) = \mathbb{1} = T(\mathbb{\Delta})T^*(\mathbb{\Delta})$$

2) Composição: o estado do sistema obtido por duas translações sucessivas, a primeira com parâmetro $\mathbb{\Delta}_1 \in \mathbb{R}^3$ e a segunda com parâmetro $\mathbb{\Delta}_2 \in \mathbb{R}^3$ deve ser equivalente ao

estado obtido por uma única translação com parâmetro $\Delta_1 + \Delta_2 \in \mathbb{R}^3$. Assim, demandamos que:

$$T(\Delta_2)T(\Delta_1)|x'\rangle = |x' + \Delta_1 + \Delta_2\rangle = T(\Delta_1 + \Delta_2)|x'\rangle$$

$$\Rightarrow T(\Delta_2)T(\Delta_1) = T(\Delta_1 + \Delta_2).$$

Naturalmente, se escolhermos $\Delta_2 = -\Delta_1$, esperamos que a translação resultante de tal composição não altere a posição do sistema. Portanto,

$$T(0) = T(\Delta - \Delta) = T(\Delta)T(-\Delta) = \mathbb{1}.$$

Essa simples observação possui duas conseqüências muito importantes. Primeiramente, associado ao parâmetro (translacional) $0 \in \mathbb{R}^3$ está o operador identidade, i.e., $T(0) = \mathbb{1}$. Em segundo lugar, para qualquer parâmetro translacional $\Delta \in \mathbb{R}^3$, existe um outro parâmetro $-\Delta$ tais que as translações a eles associadas são operações inversas, i.e., $\forall \Delta \in \mathbb{R}$, $T(-\Delta) = T^{-1}(\Delta)$. Combinando essas duas propriedades com a associatividade da multiplicação de operadores, concluímos que os operadores de translação devem formar um grupo.

3) Continuidade: considere o movimento de uma partícula entre dois pontos $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$ arbitrários, se $x_1 \neq x_2$, naturalmente, esperamos que em sua trajetória, a partícula passe por todos os pontos intermediários $(x_1, x_2) \subset \mathbb{R}$. Dessa forma, deve existir um parâmetro que leve a partícula originalmente em x_1 a qualquer outro ponto do intervalo (x_1, x_2) por mais próximo que tal ponto arbitrário esteja de x_1. Conseqüentemente, devemos requerer que a translação espacial seja uma operação contínua em seu parâmetro, i.e.,

$$\lim_{\Delta \to 0} T(\Delta) = \mathbb{1}.$$

Claramente, tal discussão deve permanecer válida independentemente da dimensão do espaço. Logo, de uma maneira geral, devemos ter que:

$$\lim_{\Delta \to 0} T(\Delta) = \mathbb{1}.$$

A discussão anterior permite concluir que o conjunto $\{T(\mathbb{\Delta}): D \subseteq \mathcal{H} \to \mathcal{H},\ \mathbb{\Delta} \in \mathbb{R}^3\}$ constitui um grupo de operadores contínuos, que no caso unidimensional, $\Delta \in \mathbb{R}$, corresponde a um grupo uniparamétrico, similar ao discutido no contexto da evolução temporal. Assim, podemos proceder de uma maneira semelhante considerando uma versão infinitesimal do operador de translação:

$$T(\mathbb{\Delta}) = \mathbb{1} - i\,\mathbb{K}\cdot\mathbb{\Delta} + O(\|\mathbb{\Delta}\|^2)$$

onde $\mathbb{\Delta}$ é um parâmetro infinitesimal e $\mathbb{K} = (K_x, K_y, K_z)$ são operadores autoadjuntos atuando em $D \subseteq \mathcal{H}$. Verifiquemos que ele satisfaz às três propriedades que enunciamos anteriormente.

1) Unitariedade:

$$\begin{aligned} T(\mathbb{\Delta})^* T(\mathbb{\Delta}) &= (\mathbb{1} + i\,\mathbb{K}^*\cdot\mathbb{\Delta})(\mathbb{1} - i\,\mathbb{K}\cdot\mathbb{\Delta}) + O(\|\mathbb{\Delta}\|^2) \\ &= \mathbb{1} + i\,\mathbb{K}^*\cdot\mathbb{\Delta} - i\,\mathbb{K}\cdot\mathbb{\Delta} + (\mathbb{K}^*\cdot\mathbb{\Delta})(\mathbb{K}\cdot\mathbb{\Delta}) + O(\|\mathbb{\Delta}\|^2) \\ &= \mathbb{1} + i\,\mathbb{\Delta}\cdot(\mathbb{K}^* - \mathbb{K}) + O(\|\mathbb{\Delta}\|^2) \\ &= \mathbb{1} \end{aligned}$$

2) Composição:

$$\begin{aligned} T(\mathbb{\Delta}_1) T(\mathbb{\Delta}_2) &= (\mathbb{1} - i\,\mathbb{K}\cdot\mathbb{\Delta}_1)(\mathbb{1} - i\,\mathbb{K}\cdot\mathbb{\Delta}_2) + O(\|\mathbb{\Delta}\|^2) \\ &= \mathbb{1} - i\,\mathbb{K}\cdot(\mathbb{\Delta}_1 + \mathbb{\Delta}_2) - (\mathbb{K}\cdot\mathbb{\Delta}_1)(\mathbb{K}\cdot\mathbb{\Delta}_2) + O(\|\mathbb{\Delta}\|^2) \\ &= \mathbb{1} - i\,\mathbb{K}\cdot(\mathbb{\Delta}_1 + \mathbb{\Delta}_2) + O(\|\mathbb{\Delta}\|^2) \\ &= T(\mathbb{\Delta}_1 + \mathbb{\Delta}_2) \end{aligned}$$

3) Continuidade:

$$\begin{aligned} \lim_{\mathbb{\Delta}\to 0} T(\mathbb{\Delta}) &= \lim_{\mathbb{\Delta}\to 0} \left(\mathbb{1} - i\,\mathbb{K}\cdot\mathbb{\Delta} + O(\|\mathbb{\Delta}\|)^2\right) \\ &= \mathbb{1} \end{aligned}$$

Nossa próxima tarefa consiste em determinar o operador $\mathbb{K}$, a relação que deduzimos a seguir entre $\mathbb{K}$ e o operador posição $\mathbb{Q}$ será fundamental nesta empreitada. Note inicialmente que

$$Q_i T(\mathbb{\Delta}) |\mathbb{x}'\rangle = Q_i |\mathbb{x}' + \mathbb{\Delta}\rangle = (x'_i + \Delta_i) |\mathbb{x}' + \mathbb{\Delta}\rangle, \quad i = 1,2,3$$

por outro lado,

$$T(\mathbb{\Delta}) Q_i |\mathbb{x}'\rangle = T(\mathbb{\Delta}) (x'_i |\mathbb{x}'\rangle) = x'_i T(\mathbb{\Delta}) |\mathbb{x}'\rangle = x'_i |\mathbb{x}' + \mathbb{\Delta}\rangle, \quad i = 1,2,3 .$$

Logo,

$$[Q_i, T(\mathbb{\Delta})] |\mathbb{x}'\rangle = \Delta_i |\mathbb{x}' + \mathbb{\Delta}\rangle, \quad i = 1,2,3 .$$

Notando que o estado $\Delta_i |\vec{\mathbb{x}} + \mathbb{\Delta}\rangle$ é de segunda ordem em $\mathbb{\Delta}$, e que podemos expandir $|\vec{\mathbb{x}} + \mathbb{\Delta}\rangle$ da seguinte forma:

$$|\vec{\mathbb{x}} + \mathbb{\Delta}\rangle = |\vec{\mathbb{x}}\rangle + O(\|\mathbb{\Delta}\|),$$

em virtude do caráter infinitesima do parâmetro $\mathbb{\Delta}$, temos que:

$$[Q_i, T(\mathbb{\Delta})] |\vec{\mathbb{x}}\rangle = \Delta_i |\vec{\mathbb{x}}\rangle + O(\|\mathbb{\Delta}\|^2), \quad i = 1,2,3 .$$

Finalmente, usando o fato de que os vetores generalizados $|\vec{\mathbb{x}}\rangle$ formam uma base de $\mathcal{H}$, podemos escrever a seguinte identidade operatorial:

$$[Q_i, T(\mathbb{\Delta})] = \Delta_i \cdot \mathbb{1} .$$

Empregando explicitamente a representação infinitesimal do operador de translação na relação acima, obtemos:

$$-i\, Q_j (\mathbb{K} \cdot \mathbb{\Delta}) + i (\mathbb{K} \cdot \mathbb{\Delta}) Q_j = \Delta_j \mathbb{1}, \quad j = 1,2,3$$

$$\Rightarrow Q_j K_\ell \Delta_\ell - K_\ell \Delta_\ell Q_j = i \Delta_j \mathbb{1}, \quad j,\ell = 1,2,3 \text{ com a soma sobre } \ell \text{ subentendida}$$

$$\Rightarrow (Q_j K_\ell - K_\ell Q_j) \Delta_\ell = i \Delta_j \mathbb{1}$$

$$\Rightarrow Q_j K_\ell - K_\ell Q_j = i \delta_{\ell j} \mathbb{1}$$

$$\Rightarrow [Q_j, K_\ell] = i \delta_{\ell j} \mathbb{1} .$$

A relação acima é conhecida como relação fundamental de comutação entre os operadores de posição Q_i e os geradores de translações infinitesimais K_i, $i = 1,2,3$.

8.5 - Momento como o gerador das translações

Nesta seção abordamos diretamente o significado físico do gerador de translações infinitesimais, o operador $\mathbb{K}$. Para tanto precisamos invocar mais um dos conceitos centrais da MC, a saber, a noção de momento canonicamente conjugado. Os momentos canonicamente conjugados surgem quando passamos da descrição lagrangiana para a hamiltoniana através de uma transformada de Legendre. Neste processo, as velocidades generalizadas $\dot{q}_i$, ou seja as derivadas temporais das coordenadas generalizadas q_i empregadas na formulação lagrangiana, são substituídas pelos momentos conjugados às coordenadas generalizadas:

$$p_i(q_i, \dot{q}_i, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} .$$

Com isso a descrição de um sistema físico na formulação hamiltoniana é feita por pares de coordenadas, denominadas canônicas, q_i e p_i, que satisfazem

$$\{q_i, q_j\} = 0, \quad \{p_i, p_j\} = 0, \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij} . \qquad (*)$$

Em particular, quando as coordenadas generalizadas q_i coincidem com as coordenadas cartesianas x_i, os momentos canonicamente conjugados correspondem em geral (por exemplo, na ausência de campos eletromagnéticos) ao momento linear usual: $p_i = m\dot{x}_i$.

Além das relações (*) serem extremamente similares às relações de comutação entre dois operadores de posição:

$$[Q_i, Q_j] = 0$$

e entre um operador de posição e um gerador de translações infinitesimais:

$$[Q_j, K_\ell] = i\,\delta_{j\ell} ,$$

Sabemos que o momento é o gerador das translações infinitesimais da coordenada canonicamente conjugada. Com isso somos levados a especular que o operador K_i está de alguma forma relacionado com o operador momento na MQ.

Podemos então identificar o operador $\mathbb{K}$ com o operador momento? Não diretamente, pois tal identificação não faz sentido algum dimensionalmente. De fato, para que a quantidade $\mathbb{K} \cdot \mathbb{\Delta}$ seja adimensional, o operador $\mathbb{K}$ deve ter dimensões de $1/$comprimento. No entanto, nada nos impede de escrever:

$$\mathbb{K} = \mathbb{P}/\text{constante universal com dimensão de ação}.$$

Infelizmente não podemos determinar tal constante unicamente a partir dos axiomas da MQ. Ela coincide, contudo, com a mesma constante $\hbar$ que aparece na famosa relação proposta por de Broglie em 1924,

$$\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar},$$

onde λ representa o comprimento de onda da onda associada a uma dada partícula. Em outras palavras, o operador $\mathbb{K}$ corresponde ao número de onda, ou seja, 2π dividido pelo comprimento de onda, usualmente denotado por k.

Com isso podemos escrever o operador de translação infinitesimal da seguinte forma:

$$T(\mathbb{\Delta}) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\mathbb{P} \cdot \mathbb{\Delta} + O(\|\mathbb{\Delta}\|^2),$$

onde $\mathbb{P} = (P_x, P_y, P_z) : D \subseteq \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ é o operador momento. A relação de comutação fundamental assume a seguinte forma:

$$[Q_j, P_l] = i\hbar\,\delta_{jl}.$$

Fica claro, pois, que Q_x e P_x são observáveis incompatíveis, ou seja, é impossível encontrar autoestados simultâneos de Q_x e P_x. Uma conseqüência imediata da presente discussão e do teorema 7.7 é a famosa relação de incerteza de Heisenberg para o momento e a posição de uma partícula:

$$\langle(\Delta Q_x)^2\rangle\langle(\Delta P_x)^2\rangle \geq \hbar^2/4.$$

Note, contudo, que Q_x e P_y são, por exemplo, observáveis compatíveis.

Desejamos a seguir encontrar uma expressão para o operador de translação envolvendo parâmetros $\mathbb{\Delta}$ finitos. Para tanto vamos proceder exatamente como no caso do operador de evolução temporal e deduzir uma equação diferencial a partir do operador infinitesimal.

A propriedade de composição nos permite escrever:

$$T(\mathbb{x}+\mathbb{\Delta}) = T(\mathbb{\Delta})T(\mathbb{x})$$
$$= \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\mathbb{P}\cdot\mathbb{\Delta}\right)T(\mathbb{x}) + O(\|\mathbb{\Delta}\|^2),$$

onde $\mathbb{\Delta}$ é um parâmetro infinitesimal, enquanto que $\mathbb{x}$ é arbitrário. Para simplificar o argumento, consideremos inicialmente o caso unidimensional. Tomando $\mathbb{\Delta} = \Delta e_x$ e $\mathbb{x} = x e_x$, a fórmula acima fica:

$$T(x+\Delta) = \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}P_x\Delta\right)T(x) + O(\Delta^2)$$
$$\Rightarrow T(x+\Delta) - T(x) = -\frac{i}{\hbar}P_x\Delta\, T(x) + O(\Delta^2)$$

Considerando o limite:

$$\frac{T(x+\Delta)-T(x)}{\Delta}|\psi\rangle \xrightarrow{\Delta\to 0} |\varphi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \forall |\psi\rangle \in D \subseteq \mathcal{H}$$

na norma de $\mathcal{H}$, que define a derivada do operador $T(x)$ em $x \in \mathbb{R}$:

$$\partial_x T(x)|\psi\rangle = \lim_{\Delta\to 0}\frac{T(x+\Delta)-T(x)}{\Delta}|\psi\rangle,$$

com respeito à topologia induzida pela norma de $\mathcal{H}$. Da nossa discussão anterior tal $T(x)$, com $x \in \mathbb{R}$ constitui um grupo uniparamétrico de operadores, de forma que $T(x)$ é infinitamente diferenciável em um subespaço denso de $\mathcal{H}$. Logo, em tal domínio, temos que:

$$i\hbar\,\partial_x T(x) = P_x T(x).$$

Portanto, se $P_x : D(P_x) \subseteq \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, for um operador linear, autoadjunto, definido em um subespaço denso $D(P_x) \subseteq \mathcal{H}$ e independente do parâmetro translacional, temos que uma solução da equação diferencial acima, sujeita à condição de contorno:

$$T(0) = \mathbb{1},$$

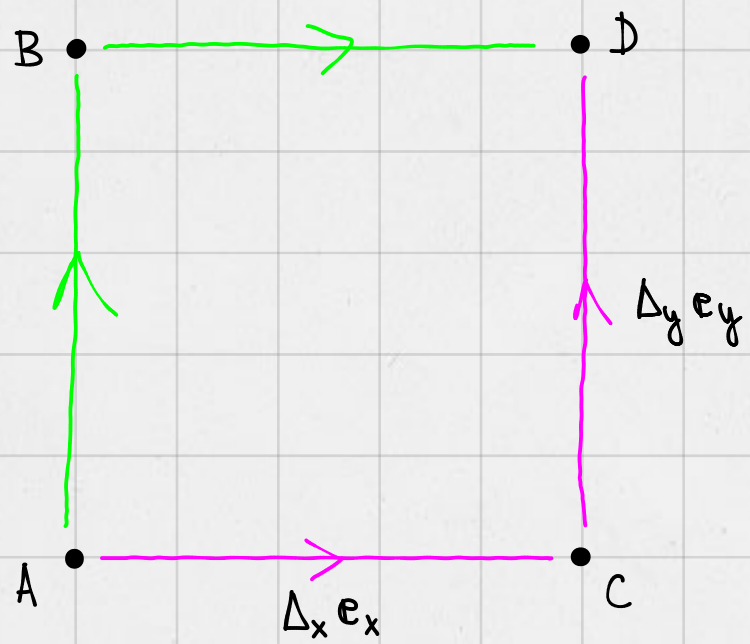
é dada por:

$$T(x) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} x P_x\right] := \int_{p \in \sigma(P_x)} e^{-\frac{i}{\hbar} x p} \, d\Pi_p \, , \quad \forall x \in \mathbb{R} .$$

O resultado acima é trivialmente generalizado para translações finitas ao longo de qualquer eixo coordenado $\hat{O}_j$, $j = 1,2,3$, a partir de um ponto arbitrário $x \in \mathbb{R}^3$:

$$T(\Delta e_j) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \Delta P_j\right].$$

Podemos então verificar uma propriedade fundamental das translações, a saber, que duas translações sucessivas ao longo de direções distintas, por exemplo $\hat{O}_x$ e $\hat{O}_y$, comutam. Pictoricamente, tal resultado parece trivial, pois para chegarmos ao ponto D partindo do ponto A tanto faz qual dos caminhos, o verde passando pelo ponto B ou o caminho rosa através do ponto C, tomamos. Matematicamente, devemos ter:



$$T(\Delta_y e_y) T(\Delta_x e_x) = T(\Delta_y e_y + \Delta_x e_x),$$
$$T(\Delta_x e_x) T(\Delta_y e_y) = T(\Delta_y e_y + \Delta_x e_x).$$

Logo,

$$[T(\Delta_y e_y), T(\Delta_x e_x)] = 0 .$$

Por outro lado, expandindo as exponenciais até a segunda ordem em Δ_x e Δ_y:

$$T(\Delta_x e_x) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \Delta_x P_x - \frac{1}{2\hbar^2} (\Delta_x)^2 P_x^2 + O(\Delta_x^3),$$
$$T(\Delta_y e_y) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \Delta_y P_y - \frac{1}{2\hbar^2} (\Delta_y)^2 P_y^2 + O(\Delta_y^3),$$

obtemos a seguinte expressão de segunda ordem para o comutador:

$$[T(\Delta_y e_y), T(\Delta_x e_x)] = \left[-\frac{i\Delta_y}{\hbar}P_y, -\frac{i\Delta_x}{\hbar}P_x\right] + \left[-\frac{i\Delta_y}{\hbar}P_y, -\frac{\Delta_x^2}{2\hbar^2}P_x^2\right] + \left[-\frac{\Delta_y^2}{2\hbar^2}P_y^2, -\frac{i\Delta_x}{\hbar}P_x\right]$$
$$+ \left[-\frac{\Delta_y^2}{2\hbar^2}P_y^2, -\frac{\Delta_x^2}{2\hbar^2}P_x^2\right] + O(\Delta^3)$$
$$= -\frac{\Delta_x\Delta_y}{\hbar^2}[P_y, P_x] + O(\Delta^3).$$

Portanto, para que translações ao longo das direções e_x e e_y comutem é necessário que:

$$[P_y, P_x] = 0.$$

De uma forma mais geral, para que translações ao longo de direções distintas comutem, devemos ter que:

$$[P_i, P_j] = 0, \quad i,j = 1,2,3.$$

A relação acima implica que os observáveis associados a cada uma das componentes do momento, i.e., P_x, P_y e P_z, são compatíveis. Logo, existem autoestados generalizados simultâneos de P_x, P_y e P_z:

$$|\mathbb{p}'\rangle = |p_x', p_y', p_z'\rangle \in \mathcal{D}(\mathbb{P}) \subseteq \mathcal{H}$$

tal que

$$P_x|\mathbb{p}'\rangle = p_x'|\mathbb{p}'\rangle, \quad P_y|\mathbb{p}'\rangle = p_y'|\mathbb{p}'\rangle, \quad P_z|\mathbb{p}'\rangle = p_z'|\mathbb{p}'\rangle.$$

Consideremos, então, a ação do operador de translação $T(\mathbb{\Delta})$ sobre um autoestado de momento

$$T(\mathbb{\Delta})|\mathbb{p}'\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbb{\Delta}\cdot\mathbb{P}}|\mathbb{p}'\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(\Delta_x P_x + \Delta_y P_y + \Delta_z P_z)}|\mathbb{p}'\rangle$$
$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta_x P_x} e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta_y P_y} e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta_z P_z}|\mathbb{p}'\rangle$$
$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta_x p_x'} e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta_y p_y'} e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta_z p_z'}|\mathbb{p}'\rangle$$
$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbb{\Delta}\cdot\mathbb{p}'}|\mathbb{p}'\rangle,$$

onde usamos explicitamente o fato de que as componentes do momento e, conseqüentemente os operadores de translação ao longo de direções distintas comutam para escrevermos a exponencial da soma de operadores como o produto das exponenciais de cada elemento da soma. Concluímos, pois, que os autoestados de momento são também autoestados do operador de translação.

Tal resultado poderia ter sido trivialmente antecipados, pois:

$$[\mathbb{P}, T(\Delta)] = 0 .$$

Note, no entanto, que o autovalor de $T(\Delta)$ é complexo, pois apesar de $T(\Delta)$ ser unitário, não é hermitiano.

As relações de comutação que deduzimos ao estudarmos as propriedades da translação no contexto da MQ:

$$[Q_i, Q_j] = 0, \; [P_i, P_j] = 0, \; [Q_j, P_k] = i\hbar \delta_{jk}$$

são conhecidas como relações canônicas de comutação e constituem um dos alicerces da MQ. Note o quão parecidas elas são com as relações satisfeitas pelas coordenadas canônicas da MC na formulação hamiltoniana:

$$\{q_i, q_j\} = 0 \; , \; \{p_i, p_j\} = 0 \; , \; \{q_j, p_k\} = \delta_{jk} .$$

Essa similaridade foi primeiramente explorada por Dirac ao propor que as relações de comutação da MQ poderiam ser obtidas a partir das respectivas relações clássicas (em termos dos parênteses de Poisson) a partir da seguinte regra de substituição

$$\{\cdot\,,\cdot\} \longrightarrow -\frac{i}{\hbar}[\cdot\,,\cdot] ,$$

conhecida como quantização canônica.

8.6 - Função de Onda no Espaço das Posições

Nesta seção estudamos em maiores detalhes a equação de autovalores/autovetores para o operador posição, com isso esclarecendo o termo autovetor generalizado que empregamos impunemente anteriormente. Por simplicidade, discutimos inicialmente apenas o caso unidimensional:

$$Q|x'\rangle = x'|x'\rangle \; , \; x' \in \sigma(Q) \subseteq \mathbb{R} \; , \; |x'\rangle \in D(Q) \subseteq \mathcal{H}$$

Como Q é autoadjunto por hipótese, podemos usar a seguinte decomposição da identidade:

$$\mathbb{1} = \int_{\sigma(Q)} d\Pi_{\tilde{x}} = \int_{\sigma(Q)} d\tilde{x} \; |\tilde{x}\rangle\langle\tilde{x}|$$

para escrever:

$$x'|x'\rangle = Q|x'\rangle = Q\int_{\sigma(Q)} d\tilde{x} \; |\tilde{x}\rangle\langle\tilde{x}|x'\rangle = \int_{\sigma(Q)} d\tilde{x} \; \tilde{x} \; |\tilde{x}\rangle\langle\tilde{x}|x'\rangle .$$

Precisamos, pois, esclarecer o significado da seguinte equação:

$$\int_{\mathbb{R}} d\tilde{x} \; f(\tilde{x}) \, \psi(\tilde{x}, x') = f(x') \qquad (*)$$

para podermos melhor entender o comportamento da função de onda na representação das posições.

Incidentalmente, a equação $(*)$ define a distribuição delta de Dirac. Por uma distribuição (temperada) entende-se um funcional linear contínuo $T : \mathcal{S}(\mathbb{R}) \longrightarrow \mathbb{C}$, ou seja, tal que

$$\lim_{n\to\infty} T(\varphi_n) = T\left(\lim_{n\to\infty} \varphi_n\right) \; , \; \forall \varphi_n \in \mathcal{S}(\mathbb{R}),$$

onde $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ denota o conjunto de todas as funções infinitamente diferenciáveis definidas em $\mathbb{R}$ que, assim como as suas derivadas, decaem a zero no infinito mais rápido do que qualquer polinômio, ou seja,

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}) = \{ f : \mathbb{R} \xrightarrow{\mathcal{C}^\infty} \mathbb{C} \mid \lim_{|x|\to\infty} p(x) f^{(q)}(x) = 0 \, , \; \forall p \in \mathrm{Pol}(\mathbb{R}, m) \, , \; \forall m, q \in \mathbb{N} \}.$$

Tal espaço de funções é denominado espaço de Schwartz. Dessa forma, uma distribuição temperada não passa de um elemento contínuo do espaço dual ao espaço de Schwartz, $\mathcal{S}(\mathbb{R})'$.

Com isso podemos finalmente definir a distribuição delta de Dirac centrada no ponto $x' \in \mathbb{R}$, denotada por $\delta_{x'}$, como a distribuição (temperada) que a cada $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ associa o seu valor no ponto x', $f(x')$, ou seja,

$$\delta_{x'}(f) = f(x'). \qquad (\#)$$

Note que a relação acima corresponde exatamente a (*). Para explicitar ainda mais tal correspondência é conveniente introduzir a noção de função generalizada de Sobolev, que permite escrever (#) como o seguinte produto interno:

$$\int_{\mathbb{R}} d\tilde{x}\; f(\tilde{x})\,\delta(\tilde{x}-x') = f(x') \;, \quad \forall f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}) .$$

A função generalizada $\delta(\tilde{x}-x')$ representa a distribuição delta de Dirac centrada em x', sendo, pois, usualmente denominada função (generalizada) delta de Dirac. É fácil constatar que se $\delta(\tilde{x}-x')$ fosse uma de fato uma função usual, teria que se anular em toda a reta real, exceto no ponto $\tilde{x}=x'$, pois $\delta_{x'}(f)$ deve se anular para toda função $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ cujo suporte não contenha x'. Conseqüentemente, o lado direito de (#) seria nulo e não igual a $f(x_0)$. É sob este ponto de vista que a noção de Sobolev constitui uma extensão do conceito usual de função.

Muitas distribuições, a delta de Dirac em particular, podem ser obtidas a partir do limite de distribuições:

$$T_{h_n}(f) = \int_{\mathbb{R}} h_n(x)\, f(x)\, dx \;, \quad \forall f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}),$$

onde $h_n : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$, $n \in \mathbb{N}$ são funções usuais. Dessa forma a função generalizada que representa tal distribuição pode ser entendida como um limite da seqüência de funções h_n. Um exemplo de seqüência de funções que aproxima neste sentido a função (generalizada) delta de Dirac é:

$$h_n : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R} \;, \quad x \longmapsto \frac{n}{\sqrt{\pi}}\, e^{-n^2x^2} \;, \quad n \in \mathbb{N},$$

que satisfaz:

$$\lim_{n\to\infty} \int_{\mathbb{R}} h_n(x-x')\, f(x)\, dx = f(x') \;, \quad \forall f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}) .$$

Notando que:

1) $\lim_{n\to\infty} h_n(x) = 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^*$;

2) $\int_{\mathbb{R}} dx\, h_n(x) = 1, \quad \forall n \in \mathbb{N}^*$;

podemos interpretar adequadamente a seqüência de funções h_n e assim desenvolver uma noção intuitiva do delta de Dirac. À medida que n cresce, a função h_n tende a se comportar como uma densidade concentrada em um único ponto $x = 0$. Assim, a distribuição delta de Dirac, caracterizada pelo limite de h_n quando $n \to \infty$, pode ser entendida como a densidade de alguma grandeza concentrada em um único ponto. Por exemplo, essa interpretação justifica o uso do delta de Dirac para representarmos a densidade de um ponto material de massa $m \in \mathbb{R}^+$ localizado na posição $x' \in \mathbb{R}$ por:

$$\rho(x) = m\,\delta(x - x'),$$

pois neste caso

$$\rho(x) = 0, \quad \forall x \neq x' \qquad \text{e} \qquad \int_{\mathbb{R}} dx\, \rho(x) = m.$$

Portanto, para satisfazer $(*)$ devemos tomar

$$\psi(\tilde{x}, x') = \delta(\tilde{x} - x'),$$

de forma que

$$\int_{\mathbb{R}} d\tilde{x}\, \psi(\tilde{x}, x')\, f(\tilde{x}) = \int_{\mathbb{R}} d\tilde{x}\, \delta(\tilde{x} - x')\, f(\tilde{x}) = f(x'), \quad \forall f \in \mathcal{T}(\mathbb{R}).$$

Lembrando que em $(*)$, $\psi(\tilde{x}, x')$ representava o produto interno $\langle \tilde{x} | x' \rangle$, concluímos que:

$$\langle \tilde{x} | x' \rangle = \delta(\tilde{x} - x').$$

Consideremos, então, que o sistema se encontre no estado $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$, devido a resolução da identidade em termos dos autoestados generalizados $|x'\rangle$, podemos escrever

$$|\alpha\rangle = \int_{\sigma(Q)} |x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle\, dx',$$

onde o coeficiente

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

corresponde à função de onda na representação das posições. Note que a quantidade

$$|\langle x'|\alpha\rangle|^2 = \bar{\psi}_\alpha(x)\psi_\alpha(x)$$

representa a densidade de probabilidade de encontrarmos a partícula descrita pelo estado $|\alpha\rangle$ nas vizinhanças do ponto $x' \in \mathbb{R}$. Naturalmente, podemos escrever o produto interno entre os estados $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}$ em termos da sobreposição das respectivas funções de onda na representação das posições:

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \int_{\sigma(Q)} d\tilde{x}\, \langle\beta|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \int_{\sigma(Q)} d\tilde{x}\, \bar{\psi}_\beta(\tilde{x})\,\psi_\alpha(\tilde{x}),$$

que representa a amplitude de probabilidade do estado $|\alpha\rangle$ ser encontrado no estado $|\beta\rangle$.

Seja então $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ um observável qualquer, e suponha que $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in D(A)$, desejamos expressar a quantidade $\langle\beta|A|\alpha\rangle$ em termos das funções de onda ψ_α e ψ_β. Claramente,

$$\begin{aligned}\langle\beta|A|\alpha\rangle &= \int_{\sigma(Q)} dx' \int_{\sigma(Q)} dx''\, \langle\beta|x'\rangle\langle x'|A|x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle \\ &= \int_{\sigma(Q)} dx' \int_{\sigma(Q)} dx''\, \bar{\psi}_\beta(x')\,\langle x'|A|x''\rangle\,\psi_\alpha(x'').\end{aligned}$$

Assim, para calcularmos $\langle\beta|A|\alpha\rangle$ basta sabermos $\langle x'|A|x''\rangle$. Consideremos o seguinte exemplo no qual o operador A é uma função do operador de posição Q:

$$A = Q^2,$$

que como veremos posteriormente aparece no hamiltoniano do oscilador harmônico a ser discutido na próxima aula. Neste caso:

$$\langle x'|Q^2|x''\rangle = \langle x'|\left(x''^2|x''\rangle\right) = x''^2\langle x'|x''\rangle = x''^2\,\delta(x'-x''),$$

cuja substituição na integral dupla acima fornece:

$$\langle \beta | Q^2 | \alpha \rangle = \int_{\sigma(Q)} dx' \int_{\sigma(D)} dx'' \, \overline{\Psi}_\beta(x') \, x''^2 \, \delta(x'-x'') \, \Psi_\alpha(x'')$$
$$= \int_{\sigma(Q)} dx' \, \overline{\Psi}_\beta(x') \, x'^2 \, \Psi_\alpha(x').$$

De uma forma mais geral podemos usar o teorema do cálculo funcional para escrever:

$$\langle \beta | f(Q) | \alpha \rangle = \int_{\sigma(Q)} dx' \, \overline{\Psi}_\beta(x') \, f(x') \, \Psi_\alpha(x'),$$

onde $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ é alguma função contínua e limitada.

8.7 - Operador Momento na Representação das Posições

Deduzimos nesta seção uma expressão para o operador momento na representação das posições, ou seja, com respeito à base formada pelos autoestados generalizados do operador posição Q. Para uma maior clareza da exposição continuamos restritos ao caso unidimensional. Considere, pois, a ação do operador de translação infinitesimal sobre um estado $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ arbitrário:

$$\left(\mathbb{1} - \frac{i\Delta}{\hbar} P \right) |\alpha\rangle = \int_{\sigma(Q)} dx' \, T(\Delta) \, |x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle$$
$$= \int_{\sigma(Q)} dx' \, |x'+\Delta\rangle\langle x'|\alpha\rangle$$
$$= \int_{\sigma(Q)} dx' \, |x'\rangle\langle x'-\Delta|\alpha\rangle.$$

Podemos então considerar o polinômio de Taylor da função de onda em primeira ordem:

$$\langle x'-\Delta|\alpha\rangle = \Psi_\alpha(x'-\Delta) = \Psi_\alpha(x') - \Delta \, \partial_{x'} \Psi_\alpha(x') + O(\Delta^2)$$
$$= \langle x'|\alpha\rangle - \Delta \, \partial_{x'} \langle x'|\alpha\rangle + O(\Delta^2),$$

cuja substituição na equação acima fornece:

$$|\alpha\rangle - \frac{i\Delta}{\hbar} P|\alpha\rangle = \int_{\sigma(Q)} dx' \, |x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle - \Delta \int_{\sigma(Q)} dx' \, |x'\rangle \, \partial_{x'} \langle x'|\alpha\rangle$$
$$\Rightarrow P|\alpha\rangle = \int_{\sigma(Q)} dx' \, |x'\rangle \left(-i\hbar \, \partial_{x'} \langle x'|\alpha\rangle \right).$$

Tomando o produto interno com $|\tilde{x}\rangle$, obtemos:

$$\begin{aligned}\langle \vec{x}|P|\alpha\rangle &= \int_{\sigma(Q)} dx' \langle \vec{x}|x'\rangle \left(-i\hbar\,\partial_{x'} \langle x'|\alpha\rangle\right) \\ &= \int_{\sigma(Q)} dx'\, \delta(\vec{x}-x') \left(-i\hbar\,\partial_{x'}\langle x'|\alpha\rangle\right) \\ &= -i\hbar\,\partial_{\vec{x}} \langle \vec{x}|\alpha\rangle \\ &= -i\hbar\,\partial_{\vec{x}} \psi_\alpha(\vec{x}).\end{aligned}$$

Similarmente, para um estado $|\beta\rangle \in \mathscr{H}$ arbitrário, temos que:

$$\begin{aligned}\langle \beta|P|\alpha\rangle &= \int_{\sigma(Q)} dx' \langle \beta|x'\rangle \left(-i\hbar\,\partial_{x'}\langle x'|\alpha\rangle\right) \\ &= \int dx'\, \bar{\psi}_\beta(x') \left(-i\hbar\,\partial_{x'}\right) \psi_\alpha(x').\end{aligned}$$

De onde concluímos que na representação das posições o operador momento é dado por:

$$P = -i\hbar\,\partial_x .$$

Naturalmente, as potências naturais do operador momento podem ser obtidas iterando as fórmulas acima:

$$\langle x'|P^n|\alpha\rangle = (-i\hbar)^n \partial^n_{x'} \psi_\alpha(x'),$$

$$\langle \beta|P^n|\alpha\rangle = \int_{\sigma(Q)} dx'\, \bar{\psi}_\beta(x') \left[(-i\hbar)^n \partial^n_{x'}\right] \psi_\alpha(x'), \quad n \in \mathbb{N} .$$

8.8 - Funções de Onda no Espaço dos Momentos

Até agora trabalhamos exclusivamente com a base constituída pelos autoestados generalizados do operador posição. Contudo, existe uma simetria entre os operadores momento e posição, evidente pela forma das relações de comutação canônicas, que não exploramos devidamente. Consideramos, portanto, nesta seção a descrição a partir de uma base de autoestados do operador momento, similarmente denominada representação dos momentos.

Por simplicidade mantemos as nossas considerações restritas ao caso unidimensional. Partindo da relação

$$P|p'\rangle = p'|p'\rangle\ , \quad \forall\, p' \in \sigma(P) \subseteq \mathbb{R}\ , \quad |p'\rangle \in \mathcal{H}$$

e procedendo exatamente como no caso do operador posição, concluímos que:

$$\langle p'|p''\rangle = \delta(p'-p'') .$$

Podemos naturalmente expandir um estado arbitrário $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ na base de auto_estados generalizados do operador momento:

$$|\alpha\rangle = \int_{\sigma(P)} dp'\, |p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle .$$

A amplitude de probabilidade

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

é usualmente denominada função de onda no espaço dos momentos. Seu módulo quadrado

$$|\langle p'|\alpha\rangle|^2 = \bar{\phi}_\alpha(p')\,\phi_\alpha(p)$$

corresponde à densidade de probabilidade de encontrarmos em uma medição do momento do sistema o valor $p' \in \sigma(P) \subseteq \mathbb{R}$.

Como podemos representar um mesmo sistema tanto na base do operador posição quanto do operador momento, deve existir uma relação entre elas. Analogamente ao caso unidimensional, esperamos obtê-la a partir da análise do seguinte produto interno $\langle x'|p'\rangle$, que é uma função tanto de p' quanto de x', usualmente denominado função de transformação entre as representações das posições e dos momentos. Utilizando a relação:

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

deduzida na seção anterior, com $|\alpha\rangle = |p'\rangle$, obtemos a seguinte equação diferencial:

$$p'\langle x'|p'\rangle = -i\hbar\,\partial_{x'}\langle x'|p'\rangle \iff p'\psi_{p'}(x') = -i\hbar\,\partial_x \psi_{p'}(x') ,$$

cuja solução geral é:

$$\psi_{p'}(x') = N\, e^{\frac{i}{\hbar}p'x'} ,$$

onde $N \in \mathbb{C}$ é uma constante de integração que determinaremos posteriormente.

Claramente, $\psi_{p'}(x')$ é uma função de duas variáveis: p' e x'. Contudo, sempre podemos fixar uma das variáveis e estudá-la como uma função de uma única variável. Fixemos, pois, a variável p'. Neste caso, $\psi_{p'}(x')$ pode ser interpretada como a amplitude de probabilidade de encontrarmos o autoestado de momento especificado por p' na posição x', indicando que a função de onda na representação das posições de um autoestado do momento é uma onda plana.

Para obtermos a constante de normalização N, notamos que:

$$\delta(x'-x'') = \langle x' | x'' \rangle = \int_{\sigma(P)} dp' \langle x' | p' \rangle \langle p' | x'' \rangle = |N|^2 \int_{\sigma(P)} dp' \, e^{\frac{ip'}{\hbar}(x'-x'')}.$$

Escolhendo $\sigma(P) = \mathbb{R}$, que corresponde ao caso onde o momento pode assumir qualquer valor, reconhecemos que

$$\int_{\mathbb{R}} dp' \, e^{\frac{ip'}{\hbar}(x'-x'')} = \hbar \int_{\mathbb{R}} d\tilde{p} \, e^{i\tilde{p}(x'-x'')} = \hbar \cdot 2\pi \, \delta(x'-x'').$$

Substituindo tal relação na equação acima, concluímos que:

$$1 = 2\pi\hbar |N|^2 \implies N = 1/\sqrt{2\pi\hbar},$$

onde escolhemos N real e positivo. Logo,

$$\psi_{p'}(x') = \langle x' | p' \rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{i}{\hbar}p'x'}.$$

Notando que,

$$\phi_{x'}(p') = \langle p' | x' \rangle = \overline{\langle x' | p' \rangle} = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{-\frac{i}{\hbar}p'x'},$$

concluímos similarmente que a amplitude de probabilidade de encontrarmos um autoestado do operador posição especificado por $x' \in \sigma(Q)$ com momento p' também é descrita por uma onda plana.

Podemos finalmente deduzir a relação entre as funções de ondas nas representações dos momentos e das posições. Para tanto, basta que reescrevamos:

$$\langle x'|\alpha\rangle = \int_{\mathbb{R}} dp' \langle x'|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle \quad e \quad \langle p'|\alpha\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx' \langle p'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle$$

da seguinte forma:

$$\psi_\alpha(x') = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} dp'\, e^{\frac{i}{\hbar}p'x'} \phi_\alpha(p') \quad e \quad \phi_\alpha(p') = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} dx'\, e^{-\frac{i}{\hbar}p'x'} \psi_\alpha(x') .$$

Demonstramos, pois, que as representações no espaço dos momentos e no espaço das posições estão relacionadas pela transformada de Fourier.

8.9 - Generalização para 3-Dimensões

Todas as nossas considerações, feitas originalmente para o caso unidimensional, podem facilmente ser estendidas para o caso tridimensional. Para tanto, devemos partir das equações:

$$Q_i\,|\mathbb{x}\rangle = x_i\,|\mathbb{x}\rangle \quad e \quad P_i\,|\mathbb{p}\rangle = p_i\,|\mathbb{p}\rangle \ , \quad i = 1,2,3,$$

que implicam às seguintes relações:

$$\langle \mathbb{x}'|\mathbb{x}''\rangle = \delta(x_1'-x_1'')\,\delta(x_2'-x_2'')\,\delta(x_3'-x_3'') \equiv \delta^{(3)}(\mathbb{x}'-\mathbb{x}''),$$

$$\langle \mathbb{p}'|\mathbb{p}''\rangle = \delta(p_1'-p_1'')\,\delta(p_2'-p_2'')\,\delta(p_3'-p_3'') \equiv \delta^{(3)}(\mathbb{p}'-\mathbb{p}'').$$

Usando as decomposições da unidade:

$$\mathbb{1} = \int_{\sigma(Q)} d\mathbb{x}'\,|\mathbb{x}'\rangle\langle \mathbb{x}'| \quad e \quad \mathbb{1} = \int_{\sigma(P)} d\mathbb{p}'\,|\mathbb{p}'\rangle\langle \mathbb{p}'|$$

podemos escrever um estado arbitrário $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ da seguinte forma:

$$|\alpha\rangle = \int_{\sigma(Q)} d\mathbb{x}'\,|\mathbb{x}'\rangle\langle \mathbb{x}'|\alpha\rangle \quad e \quad |\alpha\rangle = \int_{\sigma(P)} d\mathbb{p}'\,|\mathbb{p}'\rangle\langle \mathbb{p}'|\alpha\rangle,$$

a partir das quais identificamos as funções de onda na representação das posições:

$$\psi_\alpha(\mathbb{x}') = \langle \mathbb{x}'|\alpha\rangle$$

e na representação dos momentos:

$$\phi_\alpha(\mathbb{p}') = \langle \mathbb{p}'|\alpha\rangle.$$

O operador momento na representação das posições assume a seguinte forma:

$$\langle \beta | \mathbb{P} | \alpha \rangle = \int_{\Gamma(Q)} d\mathbf{x}' \, \overline{\Psi}_\beta(\mathbf{x}') \left(-i\hbar \nabla'\right) \Psi_\alpha(\mathbf{x}') .$$

Já a função de transformação é dada por:

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}' \rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} \, e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'},$$

de forma que:

$$\Psi_\alpha(\mathbf{x}') = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{p}' \, e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'} \phi_\alpha(\mathbf{p}')$$

e

$$\phi_\alpha(\mathbf{p}') = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{x}' \, e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'} \Psi_\alpha(\mathbf{x}') .$$