Notas de Aula da Disciplina
Mecânica Quântica

Alexandre Souto Martinez
Universidade de São Paulo - USP
Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - FFCLRP
Departamento de Física - DF

tel.: 0xy16 3315-3720
e-mail: asmartinez@ffclrp.usp.br

March 16, 2017

Chapter 1

As Ferramentas Matemáticas da Mecânica Quântica

Este capítulo é destinado a apresentar algumas ferramentas matemáticas utilizadas em mecânica quântica.

1.1 Espaços Vetoriais Lineares

Um espaço vetorial linear $\mathcal{V}$ é um conjunto de elementos, $\{|V_i\rangle\}$, os quais podem ser adicionados e multiplicado por escalares $\{a_i\}$ de modo que:

1. a operação leva somente a elementos de $\mathcal{V}$ (fechado);
   (a) $|V_i\rangle + |V_j\rangle = |V_j\rangle + |V_i\rangle$ (comutatividade);
   (b) $|V_i\rangle + (|V_j\rangle + |V_k\rangle) = (|V_i\rangle + |V_j\rangle) + |V_k\rangle$ (associabilidade);
   (c) existe um vetor nulo, $|0\rangle$, em $\mathcal{V}$ tal que: $|0\rangle + |V_i\rangle = |V_i\rangle + |0\rangle = |V_i\rangle$ e
   (d) para cada $|V_i\rangle$ existe um inverso $|-V_i\rangle$ em $\mathcal{V}$ tal que $|V_i\rangle + |-V_i\rangle = |0\rangle$;
2. a adição e a multiplicação por escalares obedecem as seguintes regras:
   (a) $a(|V_i\rangle + |V_j\rangle) = a|V_i\rangle + a|V_j\rangle$;
   (b) $(a_1 + a_2)|V_i\rangle = a_1|V_i\rangle + a_2|V_i\rangle$ e
   (c) $a_1(a_2|V_i\rangle) = (a_1 a_2)|V_i\rangle$.

O domínio de escalares permitidos é chamado de campo $\mathcal{F}$ sobre o qual $\mathcal{V}$ é definido.

Em mecânica quântica $\mathcal{V}$ é o conjunto de funções de quadrado somável L^2 (espaço de Hilbert) e $\mathcal{F}$ é o conjunto de todos os números complexos.

Um conjunto de vetores $\{|V_1\rangle, |V_2\rangle, \ldots\}$ é linearmente independente (LI) se não existir uma relação linear na forma $\sum_i a_i|V_i\rangle = 0$, com exceção de todos $a_i = 0$.

Um espaço vetorial é de dimensão d se ele admite no máximo d vetores LI.

Dado um conjunto de d vetores LI em $\mathcal{V}$, qualquer outro vetor em $\mathcal{V}$ pode ser escrito como sendo uma combinação linear destes vetores dados. Pode-se sempre escolher um conjunto de vetores LI para todo espaço vetorial numerável ou não-numerável. Qualquer conjunto de d vetores LI é chamado de base na qual $\mathcal{V}$ é expandido. Os coeficientes dessa expansão são chamados de componentes de um vetor na dada base.

Considere um vetor $|V\rangle$ escrito na base $\{|x_i\rangle\}$ onde:

$$|V\rangle = \sum_i c_i|x_i\rangle \;, \tag{1.1}$$

onde c_i são as componentes de $|V\rangle$ na base $\{|x_i\rangle\}$.

Se todos os vetores de $\mathcal{V}$ forem expandidos em uma dada base então:

1. para adicional vetores, adicione as componentes ;
2. para multiplicar um vetor por a, multiplique cada componente por a.

O produto interno é uma função escalar de dois vetores que satisfaz as seguintes regras:

1. $\langle V_i|V_i\rangle \geq 0$;
2. $\langle V_i|V_j\rangle = \langle V_j|V_i\rangle^*$;

3. $\langle V_i|a_jV_j + a_kV_k\rangle = a_j\langle V_i|V_j\rangle + a_k\langle V_i|V_k\rangle$.

Das regras 2 e 3 têm-se : $\langle a_iV_i + a_jV_j|V_k\rangle = a_i^*\langle V_i|V_k\rangle + a_j^*\langle V_j|V_k\rangle$.

A norma de um vetor $|V_i\rangle$ é definida por:

$$|V_i| = \sqrt{\langle V_i|V_i\rangle} \; . \tag{1.2}$$

Um vetor unitário tem norma 1.

Dois vetores $|V_i\rangle$ e $|V_j\rangle$ são ortogonais se seu produto interno se anula ($\langle V_i|V_j\rangle = 0$).

Um conjunto de vetores $\{|x_i\rangle\}$ é chamado de ortonormal se

$$\langle x_i|x_j\rangle = \delta_{i,j} \; . \tag{1.3}$$

As componentes c_i de $|V\rangle$ na base $\{|x_i\rangle\}$ é justamente o produto interno de $|V\rangle$ com $|x_i\rangle$,

$$c_i = \langle x_i|V\rangle \; . \tag{1.4}$$

A norma de um vetor pode expressa em termos das componentes:

$$|V| = \sqrt{\langle V|V\rangle} = \sum_i \langle V|V_i\rangle\langle V_i|V\rangle = \sum_i |c_i|^2 \; . \tag{1.5}$$

Usando

$$\sum_{i=1} |V_i\rangle\langle V_i| = \mathbb{1} \; , \tag{1.6}$$

o produto interno obedece a desigualdade de Schwarz:

$$|\langle V_i|V_i\rangle|^2 \leq |V_i|^2|V_j|^2 \; , \tag{1.7}$$

e a norma obedece a desigualdade triangular:

$$|V_i + V_j| \leq |V_i| + |V_j| \; . \tag{1.8}$$

1.1.1 Bases que não pertencem a $\mathcal{V}$

Algumas vezes é conveniente introduzir bases que não pertencem a $\mathcal{V}$, mas que qualquer vetor em $\mathcal{V}$ possa ser expandindo em termos dos vetores desta base.

Ondas Planas

O conjunto de todas as ondas planas de $p_x = \hbar k_x$

$$f_{k_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{\imath k_x x} \; , \tag{1.9}$$

não pertence a L^2_x, mas pode ser considerada uma base pelo índice contínuo k_x. Esta base é ortonormal pois:

$$\begin{aligned}
\langle f_{k_x}|f_{k'_x}\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x f^*_{k_x}(x) f_{k'_x}(x) \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x e^{\imath(k'_x - k_x)}(x) \\
&= \delta(k'_x - k_x) \; .
\end{aligned} \tag{1.10}$$

Escreve-se:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k_x\; e^{\imath k_x x}\tilde{\psi}(k_x) \; , \tag{1.11}$$

ou

$$\tilde{\psi}(k_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; e^{-\imath k_x x}\psi(x) \; , \tag{1.12}$$

com

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k_x e^{\imath k_x(x-x_0)} = \delta(x - x_0) \; , \tag{1.13}$$

onde $\psi(x)$ é um elemento de L^2_x. Aqui k_x é um índice contínuo que caracteriza cada função no conjunto. Toda função em L^2_x pode ser expandida de modo único em termo de $f_{k_x}(x)$. Os coeficientes da expansão são as funções $\tilde{\psi}(k_x)$.

Observe que:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k_x\; |\tilde{\psi}(k_x)|^2 \; . \tag{1.14}$$

Fonte Pontual

Considere:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; \delta(x - x_0) f(x) = f(x_0) \; , \tag{1.15}$$

então $\delta_{x_0} = \delta(x - x_0)$ pode ser considerada uma base ortonormal que não pertence a L^2_x, indexada por x_0 sobre a qual qualquer função de L^2_x pode ser expandida de modo único:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x'\; \delta(x - x')\psi(x') \; , \tag{1.16}$$

onde o coeficiente da expansão é:

$$\psi(x') = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\; \delta(x' - x)\psi(x) \; , \tag{1.17}$$

e

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x'\; |\psi(x')|^2 \; . \tag{1.18}$$

1.1.2 Notação de Dirac

Um vetor é completamente especificado pelas suas componentes em uma dada base. O mesmo vetor pode ser representado por conjuntos distintos de componentes em diferentes escolhas de bases. A notação de Dirac é uma representação de um vetor sem a escolha explicita da base. Qualquer elemento de $\mathcal{V}$ é chamado de vetor ket ou simplesmente de ket, e é representado por $|\rangle$, onde dentro do símbolo existe um sinal que distingue um dado ket de todos os outros.

1.1.3 O Espaço Dual

O funcional liner χ é uma operação linear,

$$\chi(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2>) = \lambda_1\chi|\psi_1\rangle + \lambda_2\chi|\psi_2\rangle \ , \quad (1.19)$$

a qual associa a cada vetor de $\mathcal{V}$ um escalar no domínio $\mathcal{F}$. Se $|\psi\rangle \in \mathcal{V}$ implica na existência de um escalar (número complexo) $\chi \in \mathcal{F}$.

O conjunto de todos os funcionais lineares definidos em $\mathcal{V}$ forma um espaço vetorial, o qual é chamado de espaço dual de $\mathcal{V}$ e representado por $\mathcal{V}^*$.

O produto interno $\langle\psi'|\psi\rangle$ do vetor $|\psi'\rangle$, com outros vetores $|\psi\rangle$ em $\mathcal{V}$ é um funcional linear, pois associa a cada vetor $|\psi\rangle$ ao escalar $\langle\psi'|\psi\rangle$. Esta operação é um elemento do espaço dual $calV^*$, que é representado pelo símbolo $\langle\psi'|$ e chamado de vetor bra, ou simplesmente de bra. A cada ket $|\psi\rangle$ em $\mathcal{V}$ corresponde um bra $\langle\psi|$ em $\mathcal{V}^*$. Esta correspondência é anti-linear.

Considere $|\psi\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle$ em $\mathcal{V}$. O produto interno deste ket $|\psi'\rangle$ com qualquer outro ket em $\mathcal{V}$ resulta em:

$$\begin{aligned} \langle\psi|\psi'\rangle &= \langle\psi'|\psi\rangle^* \\ &= \lambda_1^*\langle\psi'|\psi_1\rangle^* + \lambda_2^*\langle\psi'|\psi_2\rangle^* \\ &= \lambda_1^*\langle\psi_1|\psi'\rangle + \lambda_2^*\langle\psi_2|\psi'\rangle \ . \end{aligned} \quad (1.20)$$

O bra correspondente a $|\psi\rangle$ é: $\langle\psi| = \lambda_1^*\langle\psi_1| + \lambda_2^*\langle\psi_2|$. O bra correspondente a $\lambda|\psi\rangle = |\lambda\psi\rangle$ é: $\langle\lambda\psi| = \lambda^*\langle\psi|$.

Bras e Kets são adjuntos. Para encontrar o adjunto, tome o complexo conjugado de todos os escalares e substitua todo ket (bra) pelo seu bra (ket) correspondente.

1.1.4 Subespaços Vetoriais

Dado um espaço vetorial $\mathcal{V}$, um subconjunto de seus elementos que formam um espaço vetorial entre eles e chamado de subespaço de $\mathcal{V}$.

1.2 Operadores Lineares

Um operador linear Ω é uma instrução para transformar qualquer vetor $|\psi\rangle$ em $\mathcal{V}$ em um outro vetor $|\psi'\rangle$ em $\mathcal{V}$ e obdecendo as seguintes regras com λ_1 e λ_2 pertencentes a $\mathcal{F}$:

$$\Omega\lambda_1|\psi\rangle = \lambda_1\Omega|\psi\rangle \quad (1.21)$$
$$\Omega(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1\Omega|\psi_1\rangle + \lambda_2\Omega|\psi_2\rangle \quad (1.22)$$
$$\langle\psi|\lambda_1\Omega = \langle\psi|\Omega\lambda_1 \quad (1.23)$$
$$(\langle\psi_1|\lambda_1 + \langle\psi_2|\lambda_2)\Omega = \lambda_1\langle\psi_1|\Omega + \lambda_2\langle\psi_2|\Omega \quad (1.24)$$

Se a ação de um operador linear em uma base for conhecida, então a ação deste operador em qualquer vetor do espaço vetorial está determinada. Seja $\{|i\rangle\}$ uma base e $\Omega|i\rangle = |i'\rangle$. Se $|\psi\rangle = \sum_i c_i|i\rangle$ então: $\Omega\psi\rangle = \sum_i c_i\Omega|i\rangle = \sum_i c_i|i'\rangle$.[1]

1.2.1 Operador Identidade

O operador linear mais simples é o operador identidade $I = \mathbb{1}$:

$$\mathbb{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle \quad (1.25)$$
$$\langle\psi|\mathbb{1} = \langle\psi| \ . \quad (1.26)$$

1.2.2 Operador Paridade

O operador paridade inverte o sinal do ket:

$$\mathbb{p}|\psi\rangle = -|\psi\rangle \quad (1.27)$$
$$\langle\psi|\mathbb{p} = -\langle\psi| \ . \quad (1.28)$$

1.2.3 Operador Multiplicação

O operador multiplicação se transforma na multiplicação do ket:

$$\mathbb{x}|\psi\rangle = x|\psi\rangle \quad (1.29)$$
$$\langle\psi|\mathbb{x} = x^*\langle\psi| \ . \quad (1.30)$$

[1] Isto não é verdade se o operador não for um operador linear.

1.2.4 Operador Derivada

O operador derivada deriva o ket em relação à variável indicada:

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbb{x}}|\psi\rangle &= \partial_x|\psi\rangle & (1.31)\\ \langle\psi|\partial_{\mathbb{x}} &= \langle\psi|\partial_{\mathbb{x}^*} \;. & (1.32)\end{aligned}$$

1.2.5 Operador Comutador

O produto de dois operadores Ω_1 e Ω_2 é escrito como $\Omega_1\Omega_2$ e definido como: $\Omega_1\Omega_2|\psi\rangle = \Omega_1(\Omega_2|\psi\rangle)$. A ordem dos operadores é importante.

O comutador é definido como:

$$[\Omega_1, \Omega_2] = \Omega_1\Omega_2 - \Omega_2\Omega_1 \;. \quad (1.33)$$

As duas relações são úteis:

$$\begin{aligned} [\Omega_1, \Omega_2\Omega_3] &= \Omega_2\,[\Omega_1, \Omega_3] + [\Omega_1, \Omega_2]\,\Omega_3 & (1.34)\\ [\Omega_1\Omega_2, \Omega_3] &= \Omega_1\,[\Omega_2, \Omega_3] + [\Omega_1, \Omega_3]\,\Omega_2 & (1.35)\end{aligned}$$

1.2.6 Operador Inverso

O inverso de um operador Ω é representado por Ω^{-1} e satisfaz:

$$\Omega\Omega^{-1} = \Omega^{-1}\Omega = I \;. \quad (1.36)$$

Nem todos os operadores tem um operador inverso, como por exemplo o operador de projeção tratado na subsecção 1.2.11.

1.2.7 Operador Linear Adjunto

Seja Ω um operador linear. Para cada ket $\Omega|\psi\rangle = |\Omega\psi\rangle$ existe um bra $\langle\Omega\psi| = \langle\psi|\Omega^\dagger$, onde $\Omega^\dagger$ é o operador adjunto de Ω, onde:

$$\langle\psi'|\Omega^\dagger|\psi\rangle = \langle\Omega\psi'|\psi\rangle = \langle\psi|\Omega\psi'\rangle^* = \langle\psi|\Omega|\psi'\rangle^* \;. \quad (1.37)$$

Considere as seguintes regras:

$$\begin{aligned} (\Omega^\dagger)^\dagger &= \Omega & (1.38)\\ (\lambda\Omega)^\dagger &= \lambda^*\Omega^\dagger & (1.39)\\ (\Omega_1 + \Omega_2)^\dagger &= \Omega_1^\dagger + \Omega_2^\dagger & (1.40)\\ (\Omega_1\Omega_2)^\dagger &= \Omega_2^\dagger\Omega_1^\dagger & (1.41)\\ (|\psi'\rangle\langle\psi|)^\dagger &= |\psi\rangle\langle\psi'| \;. & (1.42)\end{aligned}$$

Para cada expressão existe a expressão adjunta. Para obter a expressão adjunta de uma expressão envolvendo escalares, bras, kets e operadores considere os seguintes passos:

1. substitua os escalares por seus complexos conjugados ($\lambda \to \lambda^*$);
2. substitua os kets (bras) pelos seus bras (kets) ($|\psi\rangle \to \langle\psi|$, $\langle\psi| \to |\psi\rangle$);
3. substitua os operadores pelos seus adjuntos ($\Omega \to \Omega^\dagger$), e
4. inverta a ordem dos fatores.

1.2.8 Operadores Hermiteanos

Um operador Ω é hermiteano se:

$$\Omega = \Omega^\dagger \;. \quad (1.43)$$

Um operador hermiteano satisfaz:

$$\langle\psi'|\Omega|\psi\rangle = \langle\psi|\Omega|\psi\rangle^* \;. \quad (1.44)$$

Um operador é chamado de anti-hermiteano se:

$$\Omega = -\Omega^\dagger \;. \quad (1.45)$$

1.2.9 Operadores Unitários

Um operador Ω é unitário se:

$$\Omega^\dagger = \Omega^{-1} \;. \quad (1.46)$$

de modo que: $\Omega\Omega^\dagger = \Omega^\dagger\Omega = I$. Um operador unitário satisfaz:

$$\langle\Omega\psi'|\Omega\psi\rangle = \langle\psi'|\Omega^\dagger\Omega|\psi\rangle = \langle\psi'|\psi\rangle \;. \quad (1.47)$$

1.2.10 Funções de Operadores

A função F de um operador Ω é definida por:

$$F(\Omega) = \sum_{i=0}^{\infty} f_i\Omega^i \;. \quad (1.48)$$

Um exemplo é a função exponencial:

$$e^\Omega = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\Omega^i}{i!} = I + \Omega + \frac{\Omega^2}{2} + \frac{\Omega^3}{3!} + \ldots \;. \quad (1.49)$$

Se um operador Ω é hermiteano, então $e^{\imath\Omega}$ é um operador unitário.

1.2.11 Projetores

O operador de projeção é um operador que não tem inverso. Considere $|\psi\rangle$ com $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ (norma unitária). O operador projeção é definido por:

$$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| \; , \qquad (1.50)$$

então

$$P_\psi|\psi'\rangle = |\psi\rangle \underbrace{\langle\psi|\psi'\rangle}_{\lambda} = \lambda|\psi\rangle \; , \qquad (1.51)$$

onde λ é um escalar $\lambda \in \mathcal{F}$.

Todos os operadores de projeção tem a seguinte propriedade:

$$P_\psi^2 = P_\psi \; . \qquad (1.52)$$

Se $\{|i\rangle\}^q$ é um conjunto de vetores ortonormais em $\mathcal{V}$, $\langle i|j\rangle = \delta_{i,j}$ que geram o subespaço $\mathcal{V}^q$. Seja $P_q = \sum_i |i\rangle\langle i|$. Se $|\psi\rangle \in \mathcal{V}$ então: $P_q|\psi\rangle \in \mathcal{V}^q$.

1.3 Representação no Espaço de Estados

Escolher uma representação de $|\psi\rangle$ significa escolher uma base ortonormal no espaço de estado $\mathcal{E}$. Considere um conjunto discreto $\{|i\rangle\}$ e um conjunto contínuo $\{\alpha\}$ para $\mathcal{E}$.

$$\begin{aligned} \langle i|j\rangle &= \delta_{i,j} & (1.53)\\ \langle\alpha|\alpha'\rangle &= \delta(\alpha-\alpha') \, . & (1.54) \end{aligned}$$

Qualquer ket $|\psi\rangle$ pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_i c_i|i\rangle & (1.55)\\ c_i &= \langle i|\psi\rangle \; . & (1.56) \end{aligned}$$

então:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_i c_i|i\rangle \\ &= \sum_i \langle i|\psi\rangle|i\rangle \\ &= \sum_i |i\rangle\langle i|\psi\rangle \\ &= I|\psi\rangle \\ &= |\psi\rangle \; , \end{aligned}$$

o que leva a expressão de completeza:

$$\sum_i |i\rangle\langle i| = I \; . \qquad (1.57)$$

O projetor $\sum_i |i\rangle\langle i|$ leva ao espaço gerado por $\{|i\rangle\}$, se $\{|i\rangle\}$ for uma base ortonormal então $\sum_i |i\rangle\langle i| = I$.

Analogamente para a base contínua:

$$\int \mathrm{d}\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha| = I \; . \qquad (1.58)$$

Na base $\{|i\rangle\}$, $|\psi\rangle$ é completamente especificado por $c_i = \langle i|\psi\rangle$. O bra correspondente $\langle\psi|$ é completamente especificado pela componentes $c_i^* = \langle\psi|i\rangle$ na base $\{\langle i|\}$.

Por convenção, um ket é representado por uma matriz coluna em uma determinada base (discreta);

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{bmatrix} . \qquad (1.59)$$

Um bra é então representado por uma matrix linha:

$$\langle\psi| = \begin{bmatrix} \langle 1|\psi\rangle & \langle 2|\psi\rangle & \ldots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 & c_2 & \ldots \end{bmatrix} . \qquad (1.60)$$

Se Ω é um operador linear de modo que $|\psi'\rangle = \Omega|\psi\rangle$, então:

$$\begin{aligned} |\psi'\rangle &= \sum_i b_i|i\rangle & (1.61)\\ b_i &= \sum_j \Omega_{i,j}c_j & (1.62)\\ \Omega_{i,j} &= \langle i|\Omega|j\rangle \; . & (1.63) \end{aligned}$$

Pode-se escrever $|\psi'\rangle = \Omega|\psi\rangle$ na forma matricial

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Omega_{1,1} & \Omega_{1,2} & \dots \\ \Omega_{2,1} & \Omega_{2,2} & \dots \\ \vdots & \vdots & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{bmatrix} .$$

As matrizes colunas representam $|\psi'\rangle$ e $|\psi\rangle$ e a matriz quadrada é uma representação do operador linear Ω na base $\{|i\rangle\}$. Os escalares $\Omega_{i,j} = \langle i|\Omega|j\rangle$ são os elementos da matriz do operador Ω.

Os elementos de $\Omega^\dagger$ são $\Omega^\dagger_{i,j} = \langle i|\Omega^\dagger|j\rangle = \langle j|\Omega|i\rangle^* = \Omega^*_{j,i}$.

Se o operador Ω for hemiteano, então: $\Omega_{i,j} = \Omega^*_{j,i}$. Em particular os elementos da diagonal são reais $\Omega_{i,i} = \Omega^*_{i,i}$.

1.3.1 Bases que não pertencem a $\mathcal{V}$

Algumas vezes é conveniente introduzir bases que não pertencem a $\mathcal{V}$, mas que qualquer vetor em $\mathcal{V}$ possa ser expandindo em termos dos vetores desta base.

Ondas Planas

O conjunto de todas as ondas planas de $p_x = \hbar k_x$

$$f_{k_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{\imath k_x x} \ , \tag{1.64}$$

não pertence a L^2_x, mas pode ser considerada uma base pelo índice contínuo k_x. Esta base é ortonormal pois:

$$\begin{aligned} \langle f_{k_x}|f_{k'_x}\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x f^*_{k_x}(x) f_{k'_x}(x) \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x e^{\imath(k'_x - k_x)}(x) \\ &= \delta(k'_x - k_x) \ . \end{aligned} \tag{1.65}$$

Escreve-se:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k_x\ e^{\imath k_x x}\tilde{\psi}(k_x) \ , \tag{1.66}$$

ou

$$\tilde{\psi}(k_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ e^{-\imath k_x x}\psi(x) \ , \tag{1.67}$$

com

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k_x e^{\imath k_x (x - x_0)} = \delta(x - x_0) \ , \tag{1.68}$$

onde $\psi(x)$ é um elemento de L^2_x. Aqui k_x é um índice contínuo que caracteriza cada função no conjunto. Toda função em L^2_x pode ser expandida de modo único em termo de $f_{k_x}(x)$. Os coeficientes da expansão são as funções $\tilde{\psi}(k_x)$.

Observe que:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k_x\ |\tilde{\psi}(k_x)|^2 \ . \tag{1.69}$$

Fonte Pontual

Considere:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \delta(x - x_0) f(x) = f(x_0) \ , \tag{1.70}$$

então $\delta_{x_0} = \delta(x - x_0)$ pode ser considerada uma base ortonormal que não pertence a L^2_x, indexada por x_0 sobre a qual qualquer função de L^2_x pode ser expandida de modo único:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x'\ \delta(x - x')\psi(x') \ , \tag{1.71}$$

onde o coeficiente da expansão é:

$$\psi(x') = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \delta(x' - x)\psi(x) \ , \tag{1.72}$$

e

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x'\ |\psi(x')|^2 \ . \tag{1.73}$$

1.4 Resumo

	Base Discreta	Base Contínua
Ortonormalização	$(u_i, u_j) = \delta_{i,j}$	$(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$
Completeza	$\sum_i = u_i(\vec{r})u_j(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$	$\int \mathrm{d}\alpha w_\alpha(\vec{r})w_\alpha(\vec{r'}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$
Função de Onda	$\varphi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$	$\varphi(\vec{r}) = \int \mathrm{d}\alpha c(\alpha) w_\alpha(\vec{r})$
Componentes	$c_i = (u_i, \varphi)$	$c(\alpha) = (w_\alpha, \varphi)$
Produto Escalar	$(\varphi_m, \varphi_n) = \sum_i b_i^* c_i$	$(\varphi_m, \varphi_n) = \int \mathrm{d}\alpha b_\alpha^* c_\alpha$
Quadrado da Norma	$(\varphi, \varphi) = \sum_i \lvert c_i\rvert^2$	$(\varphi, \varphi) = \int \mathrm{d}\alpha \lvert c(\alpha)\rvert^2$

Table 1.1: