

Formalismo I

Prof. Luiz T. F. Eleno

Departamento de Engenharia de Materiais
Escola de Engenharia de Lorena
Universidade de São Paulo



2019

Plano de aula

1 Espaço de Hilbert

- Espaço de Hilbert
- Propriedades do espaço de Hilbert

2 Observáveis

- Operadores lineares
- Operadores hermitianos
- Estados determinados

3 Autovalores e autofunções de um operador hermitiano

4 Espectro discreto

- Autovalores reais, autofunções ortogonais
- Algoritmo de ortogonalização de Gram-Schmidt

5 Espectro contínuo

- Exemplo 1: operador momento
- Exemplo 2: operador posição
- Ortonormalidade de Dirac

Plano de aula

1 Espaço de Hilbert

- Espaço de Hilbert
- Propriedades do espaço de Hilbert

2 Observáveis

- Operadores lineares
- Operadores hermitianos
- Estados determinados

3 Autovalores e autofunções de um operador hermitiano

4 Espectro discreto

- Autovalores reais, autofunções ortogonais
- Algoritmo de ortogonalização de Gram-Schmidt

5 Espectro contínuo

- Exemplo 1: operador momento
- Exemplo 2: operador posição
- Ortonormalidade de Dirac

Espaço de Hilbert

- Na Mecânica Quântica, as funções de onda vivem em espaços de *dimensão infinita*
 - ▶ além disso, estão normalizadas:

$$\int |\Psi|^2 dx = 1$$

Espaço de Hilbert

- $\Rightarrow$ O conjunto de todas as funções $f(x)$ quadrado-integráveis em um intervalo especificado,

$$\int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty,$$

é um espaço vetorial chamado de **Espaço de Hilbert**

As funções de onda vivem no espaço de Hilbert

Propriedades do espaço de Hilbert

- o **produto interno** de duas funções $f(x)$ e $g(x)$ é definido como

$$\langle f | g \rangle = \int_a^b f^*(x) g(x) dx$$

Propriedades do espaço de Hilbert

- o **produto interno** de duas funções $f(x)$ e $g(x)$ é definido como

$$\langle f | g \rangle = \int_a^b f^*(x) g(x) dx$$

- repare que $\langle g | f \rangle = \langle f | g \rangle^*$

Propriedades do espaço de Hilbert

- o **produto interno** de duas funções $f(x)$ e $g(x)$ é definido como

$$\langle f | g \rangle = \int_a^b f^*(x) g(x) dx$$

- repare que $\langle g | f \rangle = \langle f | g \rangle^*$
- $\langle f | f \rangle = \int_a^b |f(x)|^2 dx$ é sempre um número **real não negativo**; é **zero apenas se** $f(x) = 0$.

Propriedades do espaço de Hilbert

- o **produto interno** de duas funções $f(x)$ e $g(x)$ é definido como

$$\langle f | g \rangle = \int_a^b f^*(x) g(x) dx$$

- repare que $\langle g | f \rangle = \langle f | g \rangle^*$
- $\langle f | f \rangle = \int_a^b |f(x)|^2 dx$ é sempre um número **real não negativo**; é zero apenas se $f(x) = 0$.
- Uma função $f(x)$ está **normalizada** quando $\langle f | f \rangle = 1$

Propriedades do espaço de Hilbert

- o **produto interno** de duas funções $f(x)$ e $g(x)$ é definido como

$$\langle f | g \rangle = \int_a^b f^*(x) g(x) dx$$

- repare que $\langle g | f \rangle = \langle f | g \rangle^*$
- $\langle f | f \rangle = \int_a^b |f(x)|^2 dx$ é sempre um número **real não negativo**; é zero apenas se $f(x) = 0$.
- Uma função $f(x)$ está **normalizada** quando $\langle f | f \rangle = 1$
- duas funções $f(x)$ e $g(x)$ são **ortogonais** quando $\langle f | g \rangle = 0$

Propriedades do espaço de Hilbert

- o **produto interno** de duas funções $f(x)$ e $g(x)$ é definido como

$$\langle f | g \rangle = \int_a^b f^*(x) g(x) dx$$

- repare que $\langle g | f \rangle = \langle f | g \rangle^*$
- $\langle f | f \rangle = \int_a^b |f(x)|^2 dx$ é sempre um número **real não negativo**; é zero apenas se $f(x) = 0$.
- Uma função $f(x)$ está **normalizada** quando $\langle f | f \rangle = 1$
- duas funções $f(x)$ e $g(x)$ são **ortogonais** quando $\langle f | g \rangle = 0$
- um *conjunto* de funções $\{ f_n \}$ é **ortonormal** se todas as funções $f_n(x)$ estão normalizadas e são mutuamente ortogonais:

$$\langle f_m | f_n \rangle = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases}$$

Propriedades do espaço de Hilbert

- o **produto interno** de duas funções $f(x)$ e $g(x)$ é definido como

$$\langle f | g \rangle = \int_a^b f^*(x) g(x) dx$$

- repare que $\langle g | f \rangle = \langle f | g \rangle^*$
- $\langle f | f \rangle = \int_a^b |f(x)|^2 dx$ é sempre um número **real não negativo**; é zero apenas se $f(x) = 0$.
- Uma função $f(x)$ está **normalizada** quando $\langle f | f \rangle = 1$
- duas funções $f(x)$ e $g(x)$ são **ortogonais** quando $\langle f | g \rangle = 0$
- um conjunto de funções $\{f_n\}$ é **ortonormal** se todas as funções $f_n(x)$ estão normalizadas e são mutuamente ortogonais:

$$\langle f_m | f_n \rangle = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases}$$

- um conjunto de funções $\{f_n\}$ é **completo** se pode ser usado para representar *qualquer* função $f(x)$ do mesmo espaço como uma *combinação linear*:

$$f(x) = \sum_n c_n f_n(x)$$

- ▶ geralmente, é preciso que o conjunto $\{f_n\}$ seja infinito

Propriedades do espaço de Hilbert

- o **produto interno** de duas funções $f(x)$ e $g(x)$ é definido como

$$\langle f | g \rangle = \int_a^b f^*(x) g(x) dx$$

- repare que $\langle g | f \rangle = \langle f | g \rangle^*$
- $\langle f | f \rangle = \int_a^b |f(x)|^2 dx$ é sempre um número **real não negativo**; é zero apenas se $f(x) = 0$.
- Uma função $f(x)$ está **normalizada** quando $\langle f | f \rangle = 1$
- duas funções $f(x)$ e $g(x)$ são **ortogonais** quando $\langle f | g \rangle = 0$
- um conjunto de funções $\{f_n\}$ é **ortonormal** se todas as funções $f_n(x)$ estão normalizadas e são mutuamente ortogonais:

$$\langle f_m | f_n \rangle = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases}$$

- um conjunto de funções $\{f_n\}$ é **completo** se pode ser usado para representar *qualquer* função $f(x)$ do mesmo espaço como uma *combinação linear*:

$$f(x) = \sum_n c_n f_n(x)$$

- ▶ geralmente, é preciso que o conjunto $\{f_n\}$ seja infinito

Exercício

46. Se o conjunto de funções $\{f_n\}$ é ortonormal, use o truque de Fourier e verifique que

$$c_n = \langle f_n | f \rangle .$$

Plano de aula

- 1 Espaço de Hilbert
 - Espaço de Hilbert
 - Propriedades do espaço de Hilbert
- 2 Observáveis
 - Operadores lineares
 - Operadores hermitianos
 - Estados determinados
- 3 Autovalores e autofunções de um operador hermitiano
- 4 Espectro discreto
 - Autovalores reais, autofunções ortogonais
 - Algoritmo de ortogonalização de Gram-Schmidt
- 5 Espectro contínuo
 - Exemplo 1: operador momento
 - Exemplo 2: operador posição
 - Ortonormalidade de Dirac

Operadores lineares

- **Todos** os operadores quânticos são **lineares**:

$$\hat{Q} [af(x) + bg(x)] = a\hat{Q}f(x) + b\hat{Q}g(x)$$

- Em geral,

$$\hat{A}\hat{B}f(x) \neq \hat{B}\hat{A}f(x)$$

- Exemplos de operadores já encontrados:

- ▶ posição:

$$\hat{x} = x$$

- ▶ potencial:

$$\hat{V} = V(x)$$

- ▶ momento:

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

- ▶ energia cinética:

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

- ▶ hamiltoniano:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

- ▶ abaixamento (do oscilador harmônico):

$$\hat{a}_- = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (i\hat{p} + m\omega\hat{x})$$

Operadores hermitianos

- o **valor esperado** de um operador $\hat{Q}$ é

$$\langle Q \rangle = \int \Psi^* \hat{Q} \Psi dx = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle$$

- Se $\hat{Q}$ representa um observável, é possível *medir* seu valor e obter seu valor esperado $\langle Q \rangle$
- Se é possível medir Q , seu valor esperado deve ser real:

$$\langle Q \rangle = \langle Q \rangle^*$$

- mas já vimos que o complexo conjugado do produto interno reverte a ordem ($\langle f | g \rangle = \langle g | f \rangle^*$):

$$\Rightarrow \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle = \langle \hat{Q} \Psi | \Psi \rangle$$

- $\Rightarrow$ operadores que representam observáveis têm a seguinte propriedade:

$$\langle f | \hat{Q} g \rangle = \langle \hat{Q} f | g \rangle, \quad \forall f(x), g(x)$$

- ▶ que é equivalente a

$$\langle f | \hat{Q} f \rangle = \langle \hat{Q} f | f \rangle, \quad \forall f(x)$$

- Um operador que satisfaz essa propriedade é chamado de **operador hermitiano**

$\Rightarrow$ **Observáveis são representados por operadores hermitianos**

Exercícios

47. Verifique se os seguintes operadores são hermitianos:

(a) operador momento: $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$

(b) operador derivada: $\hat{D} = \frac{d}{dx}$

48. Mostre que a soma de dois operadores hermitianos é um operador hermitiano.

49. Se $\hat{Q}$ é um operador hermitiano e α é um número complexo, sob quais condições (em relação a α) o operador $\alpha\hat{Q}$ é hermitiano?

50. Quando o produto de dois operadores hermitianos é hermitiano?

51. Verifique se os seguintes operadores são hermitianos:

(a) operador posição: $\hat{x} = x$

(b) operador hamiltoniano: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$

52. O *operador adjunto* (ou *conjugado hermitiano*) de um operador $\hat{Q}$ é o operador $\hat{Q}^\dagger$ tal que

$$\langle f | \hat{Q}g \rangle = \langle \hat{Q}^\dagger f | g \rangle, \quad \forall f, g$$

(†=dagger) Um operador hermitiano, portanto, é igual ao seu adjunto: $\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger$

(a) Encontre os adjuntos de x , i e d/dx .

(b) Encontre o adjunto do operador levantamento do oscilador harmônico, $\hat{a}_+$.

(c) Mostre que $(\hat{Q}\hat{R})^\dagger = \hat{R}^\dagger\hat{Q}^\dagger$ para quaisquer operadores $\hat{R}$ e $\hat{Q}$.

Estados determinados

Princípio fundamental

Em geral, se tenho um conjunto de **sistemas idênticos**, ou seja, no mesmo **estado** (função de onda) Ψ , uma *medição* de qualquer observável Q de um dos sistemas resultará numa *medida* (um valor) diferente $q \Rightarrow$ **indeterminação** da Mecânica Quântica

- **Pergunta:** é possível *preparar* um sistema tal que qualquer medição de Q resultará na *mesma* medida q ?
 - ▶ Este seria um **estado determinado**
 - ▶ Já vimos (sem demonstração) um exemplo: se o sistema se encontra em um *estado estacionário* Ψ_n , uma medição da energia total sempre resultará no valor E_n correspondente a Ψ_n
- Em um estado determinado,
 - ▶ o valor esperado de Q deve ser q , ou seja, $\langle Q \rangle = q$
 - ▶ a variância de $\langle Q \rangle$ é zero, já que $\langle Q \rangle$ é sempre igual a q :

$$\sigma^2 = \langle (\hat{Q} - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle (\hat{Q} - q)^2 \rangle = \langle \Psi | (\hat{Q} - q)^2 \Psi \rangle = 0$$

- Mas, se Q é observável, então $\hat{Q}$ (e também $\hat{Q} - q$) é hermitiano. Portanto:

$$\sigma^2 = \langle (\hat{Q} - q) \Psi | (\hat{Q} - q) \Psi \rangle = 0$$

- Mas, como vimos, $\langle f | f \rangle = 0$ apenas se $f = 0$
- Então, para um estado determinado Ψ , é preciso que $(\hat{Q} - q)\Psi = 0$, ou seja,

$$\boxed{\hat{Q}\Psi = q\Psi}$$

Estados determinados e autosistemas

- No último *slide* vimos que, se Ψ é um estado determinado do operador $\hat{Q}$, vale a relação

$$\hat{Q}\Psi = q\Psi$$

- Mas quem se lembra da Álgebra Linear sabe que esse é um **problema de autovalores e autovetores**:

- ▶ Ψ é um **autovetor** de $\hat{Q}$
 - * ou **autoestado** ou **autofunção**
- ▶ q é um **autovalor** de $\hat{Q}$

- $\Rightarrow$

Estados determinados são autofunções de $\hat{Q}$

- Por exemplo, os estados determinados da energia total são as autofunções do hamiltoniano:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

que é exatamente a equação de Schrödinger independente do tempo (mas usamos ψ , minúsculo)

- ▶ o estado estacionário correspondente é $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$, que ainda é um autoestado de $\hat{H}$
- Ao conjunto de autovalores de um operador damos o nome de **espectro** desse operador
- Se duas ou mais autofunções compartilham o mesmo autovalor, dizemos que o espectro é **degenerado**

Exercícios

53. Considere o operador

$$\hat{Q} = i \frac{d}{d\phi},$$

no qual ϕ é a coordenada polar usada em duas dimensões (que pode surgir, em um contexto físico, no problema da partícula presa a um anel circular).

- (a) $\hat{Q}$ é hermitiano?
- (b) Encontre os autovalores e autofunções de $\hat{Q}$.
- (c) O espectro de $\hat{Q}$ é degenerado?

54. Considere agora o operador

$$\hat{R} = \frac{d^2}{d\phi^2}.$$

- (a) $\hat{R}$ é hermitiano?
- (b) Encontre os autovalores e autofunções de $\hat{R}$.
- (c) O espectro de $\hat{R}$ é degenerado?

Nos dois exercícios, considere que todas as funções de interesse no espaço de Hilbert são periódicas em relação a ϕ , tal que

$$f(\phi + 2\pi) = f(\phi), \quad \forall f(x)$$

(ou seja, ϕ e $\phi + 2\pi$ descrevem o mesmo ponto)

Plano de aula

- 1 Espaço de Hilbert
 - Espaço de Hilbert
 - Propriedades do espaço de Hilbert
- 2 Observáveis
 - Operadores lineares
 - Operadores hermitianos
 - Estados determinados
- 3 Autovalores e autofunções de um operador hermitiano
- 4 Espectro discreto
 - Autovalores reais, autofunções ortogonais
 - Algoritmo de ortogonalização de Gram-Schmidt
- 5 Espectro contínuo
 - Exemplo 1: operador momento
 - Exemplo 2: operador posição
 - Ortonormalidade de Dirac

Autovalores e autofunções de um operador hermitiano

- Caracterizamos as autofunções de um operador de acordo com o seu espectro de autovalores:
 - ▶ espectro **discreto**: autovalores separados entre si por valores *proibidos* de energia
 - * autofunções são normalizáveis e representam estados fisicamente realizáveis
 - ▶ espectro **contínuo**: autovalores em um intervalo contínuo
 - * autofunções não são normalizáveis e não são estados fisicamente realizáveis (mas *combinações lineares* deles são)
 - ▶ espectro **misto**: parte do espectro discreto, parte contínuo
- Alguns exemplos já vistos e outros ainda a serem estudados:

Espectro	Exemplos
Discreto	poço infinito oscilador harmônico
Contínuo	partícula livre barreira finita partículas subatômicas (em espalhamento)
Misto	poço finito átomos, moléculas, sólidos elétrons livres pontos quânticos (<i>quantum dots</i>)

Plano de aula

- 1 Espaço de Hilbert
 - Espaço de Hilbert
 - Propriedades do espaço de Hilbert
- 2 Observáveis
 - Operadores lineares
 - Operadores hermitianos
 - Estados determinados
- 3 Autovalores e autofunções de um operador hermitiano
- 4 Espectro discreto
 - Autovalores reais, autofunções ortogonais
 - Algoritmo de ortogonalização de Gram-Schmidt
- 5 Espectro contínuo
 - Exemplo 1: operador momento
 - Exemplo 2: operador posição
 - Ortonormalidade de Dirac

Espectro discreto

- Duas propriedades importantes de um **operador hermitiano** $\hat{Q}$ com **espectro discreto**:

Teorema 1.

Todos os autovalores de $\hat{Q}$ são reais.

Teorema 2.

Autofunções correspondentes a autovalores distintos são ortogonais.

- Além disso, Dirac formulou o seguinte axioma:

Axioma.

As autofunções de um operador observável são completas, ou seja, qualquer função no espaço de Hilbert pode ser expressa como uma combinação linear delas.

- Vamos demonstrar agora os Teoremas 1 e 2

Os autovalores são reais

Teorema 1.

Todos os autovalores de $\hat{Q}$ são reais.

Demonstração.

- Identificando um autovalor qualquer por q e a autofunção correspondente por f :

$$\hat{Q}f = qf$$

- Como $\hat{Q}$ é hermitiano:

$$\langle f | \hat{Q}f \rangle = \langle \hat{Q}f | f \rangle$$

- Usando a equação de autovalores e autovetores:

$$\langle f | qf \rangle = \langle qf | f \rangle$$

- Como q é constante:

$$q \langle f | f \rangle = q^* \langle f | f \rangle$$

- f é uma autofunção e, portanto, $f \neq 0$ e $\langle f | f \rangle \neq 0$. Logo:

$$q = q^*$$

- Ou seja, o autovalor q é **real** (se um número é igual ao seu complexo conjugado, esse número é real).



As autofunções são ortogonais

Teorema 2.

Autofunções correspondentes a autovalores distintos são ortogonais.

Demonstração.

- Sejam q_1 e q_2 dois autovalores *distintos* de $\hat{Q}$, com autofunções f_1 e f_2 , respectivamente:

$$\hat{Q}f_1 = q_1f_1, \quad \hat{Q}f_2 = q_2f_2$$

- Como $\hat{Q}$ é hermitiano:

$$\langle f_1 | \hat{Q}f_2 \rangle = \langle \hat{Q}f_1 | f_2 \rangle$$

- Usando a equação de autovalores e autovetores:

$$\langle f_1 | q_2f_2 \rangle = \langle q_1f_1 | f_2 \rangle$$

- Como q_1 e q_2 são constantes:

$$q_2 \langle f_1 | f_2 \rangle = q_1^* \langle f_1 | f_2 \rangle$$

- Mas, do Teorema 1, vimos que os autovalores são todos reais e, portanto, $q_1^* = q_1$. Logo:

$$q_2 \langle f_1 | f_2 \rangle = q_1 \langle f_1 | f_2 \rangle$$

$$\Rightarrow (q_2 - q_1) \langle f_1 | f_2 \rangle = 0$$

- Mas q_1 e q_2 são distintos ($q_1 \neq q_2$). Conclusão:

$$\langle f_1 | f_2 \rangle = 0$$



Autofunções ortogonais

- Lembre que já havíamos conferido que os estados estacionários do poço infinito e do oscilador harmônico são ortogonais
 - ou seja, são autofunções do operador hamiltoniano com autovalores (energias) diferentes
- Como acabamos de ver, isso **não** é uma propriedade exclusiva do hamiltoniano:
 - vale para *qualquer* observável, i.e., qualquer grandeza representada por um *operador hermitiano*
- **Cuidado!** quando o espectro é degenerado ($q_1 = q_2$, mas $f_1 \neq f_2$), o Teorema 2 não se aplica!
 - mas, usando o **algoritmo de ortogonalização de Gram-Schmidt**, podemos **construir** um conjunto ortogonal de autofunções com os mesmos autovalores
 - assim, mesmo com espectro discreto degenerado, temos sempre autofunções ortogonais
 - Em geral, ao trabalhar com o formalismo quântico com espectro discreto, *pressupomos* (se necessário) que todas as autofunções foram previamente ortogonalizadas (e, às vezes, ortonormalizadas), mesmo se o espectro é degenerado

Exercícios

55. Suponha que $f(x)$ e $g(x)$ são duas autofunções de um operador $\hat{Q}$ com o mesmo autovalor q .
- (a) Mostre que qualquer combinação linear de f e g é também uma autofunção de $\hat{Q}$ com o mesmo autovalor q .
 - (b) Verifique que $f(x) = e^x$ e $g(x) = e^{-x}$ são autofunções do operador $\frac{d^2}{dx^2}$ com o mesmo autovalor. Monte duas combinações lineares de f e g (chame-as de h_1 e h_2) que sejam ortogonais no intervalo $-1 \leq x \leq 1$, ou seja, tais que

$$\int_{-1}^1 h_1^*(x) h_2(x) dx = 0$$

- (c) Verifique que as autofunções do Ex. 1 na página 12 são ortogonais.

Lembrete: Algoritmo de ortogonalização de Gram-Schmidt

- **Objetivo:** dado um conjunto *linearmente independente* de vetores $\{a_1, a_2, a_3, \dots\}$, **encontrar** um conjunto de vetores (também linearmente independentes) **ortogonais** $\{b_1, b_2, b_3, \dots\}$, ou seja, tais que

$$\langle b_m | b_n \rangle = 0 \quad (m \neq n)$$

Algoritmo de ortogonalização de Gram-Schmidt

1. adote b_1 como qualquer combinação linear dos $\{a_n\}$; por exemplo,

$$b_1 = a_1$$

2. calcule b_2 :

$$b_2 = a_2 - \frac{\langle b_1 | a_2 \rangle}{\langle b_1 | b_1 \rangle} b_1$$

3. calcule b_3 :

$$b_3 = a_3 - \frac{\langle b_1 | a_3 \rangle}{\langle b_1 | b_1 \rangle} b_1 - \frac{\langle b_2 | a_3 \rangle}{\langle b_2 | b_2 \rangle} b_2$$

4. generalize para b_n :

$$b_n = a_n - \sum_{m=1}^{n-1} \frac{\langle b_m | a_n \rangle}{\langle b_m | b_m \rangle} b_m$$

- Obs: se quiser vetores b_n **ortonormais**, normalize-os a cada etapa: troque b_n por

$$\frac{1}{\sqrt{\langle b_n | b_n \rangle}} b_n$$

Exercícios

56. O estado fundamental do poço infinito é uma autofunção do operador momento? Se sim, qual é o seu momento? Se não, por quê?
57. Use o algoritmo de Gram-Schmidt para ortonormalizar o conjunto de funções $\{1, x, x^2, x^3\}$ no intervalo $-1 \leq x \leq 1$. Reveja a aula sobre o oscilador harmônico e identifique os resultados (a menos da normalização) com os polinômios de Legendre.
58. Demonstre que o operador levantamento do oscilador harmônico, $\hat{a}_+$, é o conjugado hermitiano do operador abaixamento $\hat{a}_-$.
59. Um operador anti-hermitiano (ou *skew*-hermitiano) $\hat{Q}$ é igual a menos seu conjugado hermitiano:

$$\hat{Q}^\dagger = -\hat{Q}.$$

- (a) Mostre que o valor esperado de um operador anti-hermitiano é imaginário.
- (b) Mostre que o comutador de dois operadores hermitianos é anti-hermitiano. E quanto ao comutador de dois operadores anti-hermitianos?

Plano de aula

- 1 Espaço de Hilbert
 - Espaço de Hilbert
 - Propriedades do espaço de Hilbert
- 2 Observáveis
 - Operadores lineares
 - Operadores hermitianos
 - Estados determinados
- 3 Autovalores e autofunções de um operador hermitiano
- 4 Espectro discreto
 - Autovalores reais, autofunções ortogonais
 - Algoritmo de ortogonalização de Gram-Schmidt
- 5 Espectro contínuo
 - Exemplo 1: operador momento
 - Exemplo 2: operador posição
 - Ortonormalidade de Dirac

Espectro contínuo

- Espectro contínuo: as autofunções não são normalizáveis
 - ▶ lembre-se da partícula livre e da barreira de potencial
- Mas as três propriedades essenciais (existência, ortogonalidade e completude) continuam válidas
- Vejamos como funciona usando dois exemplos

Exemplo 1: operador momento

Autofunções e autovalores do operador momento

- o operador momento é

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

- Sejam $f_p(x)$ a autofunção e p o autovalor. A equação para achá-los é

$$-i\hbar \frac{d}{dx} f_p(x) = p f_p(x)$$

- A solução geral é

$$f_p(x) = A e^{ipx/\hbar}$$

não é quadrado-integrável (normalizável) para qualquer valor (complexo) de p

- Se nos restringirmos a autovalores reais, existe uma certa ortogonalidade:

$$\langle f_{p'} | f_p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{p'}^*(x) f_p(x) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(p-p')x/\hbar} dx$$

- vejamos como continuar com esse problema!

Lembrete: transformadas de Fourier

- Na aula sobre a partícula livre, vimos que:
 - ▶ a Transformada de Fourier da função $f(x)$ é a função $F(k)$:

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx$$

- ▶ a Transformada de Fourier inversa da função $F(k)$ é a função $f(x)$:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{+ikx} dk$$

Exercício

60. Usando as definições acima, mostre que a *função delta de Dirac* pode ser colocada na forma

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk.$$

Lembre que a definição de $\delta(x)$ é

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases}, \text{ mas } \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0)$$

para qualquer função $f(x)$.

Exemplo 1: operador momento

Autofunções e autovalores do operador momento

- Se

$$\langle f_{p'} | f_p \rangle = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(p-p')x/\hbar} dx$$

e

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk.$$

segue que

$$\langle f_{p'} | f_p \rangle = |A|^2 2\pi \delta(p - p')$$

- Podemos adotar $A = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ de forma que as autofunções do operador momento são

$$f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

e portanto

$$\langle f_{p'} | f_p \rangle = \delta(p - p')$$

- Ou seja, continua havendo uma certa ortonormalidade, dita **ortonormalidade de Dirac**, ainda que o espectro seja contínuo (p é qualquer número real)

Exemplo 1: operador momento

Autofunções e autovalores do operador momento

- As autofunções do momento formam uma base completa: qualquer função quadrado-integrável $f(x)$ pode ser escrita como uma combinação linear delas:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(p) f_p(x) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} c(p) e^{ipx/\hbar} dp$$

- os coeficientes da expansão — a função $c(p)$ — são obtidos, como antes, pelo truque de Fourier:

$$\langle f_{p'} | f \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} c(p) \langle f_{p'} | f_p \rangle dp = \int_{-\infty}^{+\infty} c(p) \delta(p - p') dp = c(p')$$

ou usando o Teorema de Plancherel, que vimos na aula sobre a partícula livre.

- Em qualquer caso:

$$c(p) = \langle f_p | f \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ipx/\hbar} dx$$

- Repare que as autofunções do momento $f_p(x)$ (veja o slide anterior) são funções sinusoidais com comprimento de onda

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

que é novamente a *relação de de Broglie*

Exemplo 2: operador posição

Autofunções e autovalores do operador posição

- O operador posição é simplesmente $\hat{x} = x$. A autofunção $g_y(x)$ e o autovalor y então satisfazem a equação

$$xg_y(x) = yg_y(x)$$

Nessa equação, y é uma constante, ao passo que x é uma variável contínua. Veja que, para $x \neq y$, $g_y(x) = 0$. Mas, quando $x = y$, $g_y(x)$ pode ser qualquer número. Esta é a própria definição da função delta de Dirac. Portanto:

$$g_y(x) = A\delta(x - y)$$

e o autovalor y tem que ser real.

- Novamente, as autofunções não são normalizáveis, mas também obedecem à *ortonormalidade de Dirac*:

$$\langle g_{y'} | g_y \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} g_{y'}^*(x) g_y(x) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - y') \delta(x - y) dx = |A|^2 \delta(y - y')$$

- A melhor escolha para A é fazer $A = 1$ e então

$$\boxed{g_y(x) = \delta(x - y)}, \quad \boxed{\langle g_{y'} | g_y \rangle = \delta(y - y')}$$

- As autofunções da posição também são completas:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(y) g_y(x) dy = \int_{-\infty}^{\infty} c(y) \delta(x - y) dy$$

com $c(y) = f(y)$, usando o truque de Fourier.

Como conclusão...

Espectro contínuo e ortonormalidade de Dirac

- Se o **espectro** de um operador **hermitiano** é **contínuo**, as autofunções **não** são normalizáveis e **não** representam estados físicos possíveis.
- Contudo, as autofunções têm **autovalores reais**, são **ortonormalizáveis de Dirac** e **completas** (com a somatória da combinação linear como uma integral sobre o espectro contínuo). **Isso é tudo o que precisamos.**