Autor: Henrique Fleming

6: Operadores

- Valor médio
- Adição e subtração de operadores

Seja f uma quantidade física que caracteriza o estado de um sistema quântico. Os valores que uma dada quantidade física pode assumir são chamados de autovalores. O conjunto dos autovalores é o espectro. Na mecânica clássica as quantidades físicas são contínuas.[7] Na mecânica quântica, não necessariamente. Pode haver espectros discretos ou espectros contínuos. Vamos supor, para simplificar, que o espectro de f seja discreto. Os autovalores de f serão denotados por f_n, $(n = 0,1,2...)$. A função de onda do sistema, no estado em que f tem o valor f_n, será denotada por ψ_n. Essas funções são chamadas autofunções de f. Para cada uma delas,

$$\int dq |\psi_n|^2 = 1$$

Um dos princípios básicos da mecânica quântica é este:

(I) O conjunto das autofunções de uma quantidade física f é completo. Isto é, dada uma função de onda qualquer ψ do sistema, podemos expandi-la em autofunções de f assim:

$$\psi = \sum_n a_n \psi_n$$

Onde os a_n são números complexos.

(II) Fazendo-se uma medida de f em ψ, a probabilidade de se obter o valor f_n é dada por $|a_n|^2$.
Em consequência, devemos ter

$$\sum_n |a_n|^2 = 1$$

pois $\sum_n |a_n|^2$ é a probabilidade de, medindo-se f, obter-se qualquer um dos valores possíveis.

Temos, então, o resultado

$$\sum_n a_n a_n^* = \int dq \psi \psi^*$$

Por outro lado, temos

$$\psi^* = \sum a^*{}_n \psi^*{}_n$$

logo,

$$\int dq \psi \psi^* = \int \psi \sum_n a^*{}_n \psi^*{}_n dq$$
$$= \sum_n a_n^* \int \psi^*{}_n \psi dq$$
$$= \sum_n a^*{}_n a_n$$

de onde se conclui que

$$a_n = \int \psi_n^* \psi dq$$

Finalmente, usando $\psi = \sum_m a_m \psi_m$, temos

$$a_n = \int dq \psi_n^* \sum_m a_m \psi_m = \sum_m a_m \psi_m \int \psi_n^* \psi_m dq$$

de onde se concluique

$$\int dq \psi_n^* \psi_m = \delta_{nm}$$

Diz-se então que as autofunções são ortogonais.

Valor médio

Vamos introduzir agora o conceito de valor médio $\overline{f}$ da quantidade física f em um dado estado. Sejam f_n os valores possíveis de f, ou seja, seus autovalores. Sejam $|a_n|^2$ as probabilidades de cada um dos autovalores , no estado em questão. Define-se então o valor médio como

$$\overline{f} = \sum_n f_n |a_n|^2$$

Usa-se também a notação $\langle f \rangle$, para a mesma quantidade. Queremos encontrar uma expressão para $\overline{f}$ em termos da função de onda do estado considerado. Seja ψ esta função. Para fazer isso vamos associar à quantidade física f um operador linear $\hat{f}$ que atua sobre as funções de onda. Seja $\hat{f}\psi$ a função obtida quando $\hat{f}$ atua sobre ψ. Queremos, de $\hat{f}$, que

$$\overline{f} = \int dq \psi^* \left(\hat{f} \psi \right)$$

para qualquer estado ψ (lembre-se que estipulamos que as quantidades físicas deveriam ser expressões bilineares na função de onda). Então,

$$\overline{f} = \sum_n f_n a_n a_n^* = \int dq \psi^* \sum_n a_n f_n \psi_n$$

onde usamos $a_n = \int dq \psi^* \psi_n$, obtido anteriormente. Vemos, primeiramente, que

$$\overline{f} \psi = \sum_n a_n f_n \psi_n$$

ora,

$$\psi = \sum_n a_n \psi_n$$

de maneira que $\overline{f}$ é linear, e que

$\hat{f} \psi_n = f_n \psi_n$

Sumarizando:

$$\hat{f}\psi_n = f_n\psi_n$$
$$\hat{f} = \int dq\psi^* \hat{f}\psi$$
$$a_n = \int dq\psi_n^*\psi$$
$$\int dq\psi_n^*\psi_m = \delta_{nm}$$

Os valores assumidos por uma quantidade física são reais. Portanto, os valores médios $\bar{f}$ de uma quantidade física são também reais, como se vê de $\bar{f} = \sum_n f_n |a_n|^2$. Note-se (exercício fácil), que, se o estado for uma autofunção de f, o valor médio $\bar{f}$ coincide com o autovalor de f nesse estado.

Do fato de $\bar{f}$ ser real segue uma propriedade importante dos operadores associados a quantidades físicas:

$$\bar{f} = \int dq\psi^* \hat{f}\psi = \bar{f}^* = \left(\int dq\psi^* \hat{f}\psi\right)^* \tag{5}$$

ora,

$$\left(\int dq\psi^*\left(\hat{f}\psi\right)\right)^* = \int\left(\psi^*\left(\hat{f}\psi\right)dq\right)^* = \int\psi\left(\hat{f}\psi\right)^* dq = \int\psi\hat{f}^*\psi^* dq \tag{6}$$

onde $\hat{f}^*$ é definido assim: se $\hat{f}\psi = \phi$, então $\hat{f}^*$ é o operador tal que $\hat{f}^*\psi^* = \phi^*$.[8] Então,

$$\int\psi^*\hat{f}\psi dq = \int\psi\hat{f}^*\psi^* dq$$

Vamos definir o operador transposto ${}^t\hat{f}$ do operador $\hat{f}$. Sejam ψ e ϕ funções arbitrárias. Então ${}^t\hat{f}$ é tal que

$$\int\psi^*\left({}^t\hat{f}\right)\phi dq = \int\phi\hat{f}\psi^* dq$$

Por exemplo, para $\psi = \phi_i$,

$$\int \psi \hat{f}^* \psi^* dq = \int \psi^* \left({}^t \hat{f}^* \right) \psi dq$$

Da condição de realidade de $\overline{f}$, Eq.(6), temos

$$\int \psi^* \hat{f} \psi dq = \int \psi \hat{f}^* \psi^* dq = \int \psi^* \left({}^t \hat{f}^* \right) \psi dq \qquad (7)$$

Comparando os dois extremos vemos que

$$\hat{f} = \left({}^t \hat{f} \right)^*$$

Operadores com esta propriedade são ditos hermiteanos. Logo, os operadores associados a quantidades físicas são operadores lineares hermiteanos.

Podemos, formalmente, considerar quantidades físicas complexas, isto é, cujos autovalores são complexos. Por exemplo, dadas as coordenadas x e y,podemos considerar a quantidade x + iy. Seja f uma quantidade desse tipo, e seja f^* a quantidade cujos autovalores são os complexo-conjugados dos autovalores de f. À quantidade f corresponde o operador $\hat{f}$. Denotemos por $\hat{f}^+$ o operador correspondente à quantidade f^*. Este operador é denominado o adjunto de $\hat{f}$.

O valor médio da quantidade f^* é dado por

$$\overline{f}^* = \int \psi^* \hat{f}^+ \psi dq$$

onde apenas adaptamos a definição de média de um operador.
Ora,

$$\overline{f} = \int \psi^* \hat{f} \psi dq$$

logo,

$$\overline{f}^* = \left(\int \psi^* \hat{f} \psi dq \right)^* = \int \psi^* \hat{f}^* \psi^* dq = \int \psi^* \left({}^t \hat{f} \right)^* \psi dq$$

Mas

$$\overline{f}^* = \sum_n f_n^* |a_n|^2 = \left(\sum_n f_n |a_n|^2 \right)^* = \overline{f}^*$$

Ou seja,

$$\int \psi^* \hat{f}^+ \psi dq = \int \psi^* \left({}^t\hat{f} \right)^* \psi dq$$

Comparando, temos

$$\hat{f}^+ = \left({}^t\hat{f} \right)^*$$

Em palavras, o adjunto é o transposto do conjugado.

A condição de hermiticidade de um operador, escrita anteriormente como

$$\left({}^t\hat{f} \right) = \hat{f}^*$$

pode agora ser escrita:

$$\hat{f} = \hat{f}^+$$

e os operadores hermiteanos são aqueles que coincidem com os adjuntos. Daí serem chamados também de auto-adjuntos.

Vamos agora mostrar que a ortogonalidade das autofunções de um operador hermiteano pode ser demonstrada diretamente. Sejam f_n e f_m dois autovalores diferentes do operador hermiteano $\hat{f}$. Sejam ψ_n e ψ_m as autofunções correspondentes. Então,

$$\hat{f}\psi_n = f_n\psi_n \tag{8}$$

$$\hat{f}\psi_m = f_m\psi_m \tag{9}$$

Multiplicando a primeira por ψ_m^*, temos

$$\psi_m^* \hat{f} \psi_n = \psi_m^* f_n \psi_n = f_n \psi_m^* \psi_n$$

e

$$\int dq \psi_m^* \hat{f} \psi_n = f_n \int dq \psi_m^* \psi_n \tag{10}$$

Tomando o complexo conjugado de (9) e multiplicando por ψ_n, temos $\psi_n \hat{f}^* \psi_m^* = f_m \psi_n \psi_m^*$. Integrando,

$$\int dq \psi_n \hat{f}^* \psi_m^* = f_m \int dq \psi_n \psi_m^* \tag{11}$$

$$\int dq \psi_m^* \hat{f} \psi_n - \int dq \psi_n \hat{f}^+ \psi_m^* = (f_n - f_m) \int dq \psi_n \psi_m^* \tag{12}$$

Mas

$$\int dq \psi_n \hat{f}^* \psi_m^* = \int dq \psi_m^* ({}^t\hat{f})^* \psi_n = \int dq \psi_m^* \hat{f}^+ \psi_n = \int dq \psi_m^* \hat{f} \psi_n$$

pois $\hat{f}$ é hermiteano. Logo, o primeiro termo de (12) é zero. Conseqüentemente,

$$(f_n - f_m) \int \psi_n \psi_m^* dq = 0$$

e, como $f_n \neq f_m$,segue que

$$\int dq \psi_n \psi_m^* = 0 \quad (n \neq m)$$

Adição e subtração de operadores

Sejam f e g duas quantidades físicas que podem ter valores definidos simultaneamente. Sejam $\hat{f}$ e $\hat{g}$ seus operadores. Os autovalores da soma $f+g$ são a soma dos autovalores de f e de g. Considere o operador $\hat{f}+\hat{g}$, e sejam ψ_n as autofunções comuns a $\hat{f}$ e $\hat{g}$. Então,

$$\begin{aligned} \hat{f}\psi_n &= f_n \psi_n \\ \hat{g}\psi_n &= g_n \psi_n \end{aligned}$$

e, portanto,

$$(\hat{f}+\hat{g})\psi_n = (f_n + g_n)\psi_n$$

Este resultado pode ser generalizado para funções de onda quaisquer, assim:

$$(\hat{f}+\hat{g})\psi = \hat{f}\psi + \hat{g}\psi$$

Neste caso, tem-se

$$\overline{f+g} = \int \psi^*(\hat{f}+\hat{g})\psi dq = \int \psi^*\hat{f}\psi dq + \int \psi^*\hat{g}\psi dq = \overline{f} + \overline{g}$$

A multiplicação de operadores é definida assim:

$$(\hat{f}\hat{g})\psi = \hat{f}(\hat{g}\psi)$$

Suponhamos que ψ_n seja autofunção comum a $\hat{f}$ e $\hat{g}$. Então,

$$\hat{f}\hat{g}\psi_n = \hat{f}(\hat{g}\psi_n) = \hat{f}(g_n\psi_n) = g_n\hat{f}\psi_n = g_n f_n \psi_n$$

e

$$\hat{g}\hat{f}\psi_n = \hat{g}(\hat{f}\psi_n) = \hat{g}(f_n\psi_n) = f_n(\hat{g}\psi_n) = f_n g_n \psi_n$$

Logo, para as autofunções simultaneas, temos

$$(\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f})\psi_n = 0$$

Isto não é suficiente para se concluir que o operador

$$\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} = 0\ .$$

Contudo, como o conjunto das autofunções ψ_n é completo, temos, dada uma função de onda arbitrária, que

$$\psi = \sum_n a_n \psi_n$$

e

$$(\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f})\psi = \sum_n a_n (\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f})\psi_n = 0$$

Logo, o operador $\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}$ é zero como operador, pois leva qualquer função ao valor zero. Note-se que isto foi demonstrado para dois operadores que possuem um conjunto completo de autofunções comuns. No caso geral, esse comutador,

$$[\hat{f}, \hat{g}] \equiv \hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}$$

é diferente de zero.