

Química Teórica e Estrutural:

Aula 2

P.J.S.B. Caridade & U. Miranda

October 26, 2012

Operadores e Álgebra de Operadores

Operadores: Introdução

- Uma observável é uma variável dinâmica que pode ser medida.
- Na mecânica clássica, as observáveis físicas são representadas por funções (*e.g.*, posição em função do tempo).
- Na mecânica quântica, são representadas por **operadores**.

Operador: conjunto de regras que transformam uma função noutra função. É habitualmente representado por \hat{A}

Operadores: propriedades

- Define-se soma e diferença de dois operadores por

$$(\hat{A} + \hat{B})f(x) \equiv \hat{A}f(x) + \hat{B}f(x)$$

$$(\hat{A} - \hat{B})f(x) \equiv \hat{A}f(x) - \hat{B}f(x)$$

- Define-se produto de dois operadores \hat{A} e \hat{B} , por

$$\hat{A}\hat{B}f(x) \equiv \hat{A}[\hat{B}f(x)]$$

Operadores: Álgebra

- Dois operadores \hat{A} e \hat{B} dizem-se iguais quando $\hat{A}f(x) = \hat{B}f(x)$.
- Existe o operador unitário $\hat{1}$ e o operador nulo $\hat{0}$.
- Os operadores obedecem à lei da associação: $\hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C}$.
- Os operadores não obedecem necessariamente à lei comutativa, isto é: $\hat{A}\hat{B}$ e $\hat{B}\hat{A}$ podem não ser iguais.
- Define-se comutador $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Se $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, logo $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ e diz-se que \hat{A} comuta com \hat{B} .
- O quadrado de um operador é definido pelo produto do operador por ele próprio.
- Um operador \hat{A} diz-se linear quando se verificam as duas propriedades:
$$\hat{A}[f(x) + g(x)] = \hat{A}f(x) + \hat{A}g(x)$$
$$\hat{A}[cf(x)] = c\hat{A}f(x)$$
- Verificando-se que os operadores são lineares, podemos escrever:
$$(\hat{A} + \hat{B})\hat{C} = \hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{C}$$
$$\hat{A}(\hat{B} + \hat{C}) = \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}$$

Funções próprias e valores próprios

Se a acção de um operador \hat{A} actuando sobre uma função $f(x)$ resulta numa constante c multiplicada pela função inicial $f(x)$ diz-se que: $f(x)$ é uma função própria do operador \hat{A} e c o valor próprio associado.

$$\hat{A}f(x) = kf(x)$$