OPERADORES

Química Teórica e Estrutural

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

07/10/2013

Introdução

- Uma observável é uma variável dinâmica que pode ser medida.
- Na mecánica clássica, as observáveis físicas são representadas por funções.
- Na mecânica quântica, as observáveis são representadas por operadores

Operador: Um operador $\hat{A} : f^{(n)}(I) \mapsto f(I)$ assina uma função $A(f) \in f(I)$ para cada função $f \in f^{(n)}(I)$. Por tanto, é uma correspondência entre dois espaços de funções.

É uma regra que transforma uma função f noutra função f'.

- En geral, um operador distigue-se pela notação $\hat{A}$.
- Na mecânica quântica vamos trabalhar com **operadores lineares**.

Exemplo:

- Operador hamiltoniano $\hat{H} \longrightarrow$ energía total dum sistema.
- Operador do momento angular de orbital $\hat{L}$.
- Operador do momento angular de spin $\hat{S}$.

Propriedades dos operadores

Sejan $\hat{A}$ e $\hat{B}$ dois operadores que podem operar sobre uma função $f\left(x\right)$,

- Define-se **soma e diferença de dois operadores** por:

$$\left(\hat{A}+\hat{B}\right)f\left(x\right)\equiv\hat{A}f\left(x\right)+\hat{B}f\left(x\right) \tag{1}$$

$$\left(\hat{A}-\hat{B}\right)f\left(x\right)\equiv\hat{A}f\left(x\right)-\hat{B}f\left(x\right) \tag{2}$$

- Define-se **produto de dois operadores** por:

$$\hat{A}\hat{B}f\left(x\right)\equiv\hat{A}\left[\hat{B}f\left(x\right)\right] \tag{3}$$

Algebra de operadores

- Dois operadores $\hat{A}$ e $\hat{B}$ dizem-se iguais quando

$$\hat{A} f(x) = \hat{B} f(x) \tag{4}$$

- Existe o operador unitário $\hat{1}$ e o operador nulo $\hat{0}$.
- Os operadores obedecem à lei da associação:

$$\hat{A}\left(\hat{B}\hat{C}\right) = \left(\hat{A}\hat{B}\right)\hat{C} \tag{5}$$

- 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

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{6}$$

Se $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, logo $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0$ 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 $\hat{A}$ é linear se, para cada par de funções f e g, e para um escalar c, cumprem-se as relações:

$$\hat{A}\left(f + g\right) = \hat{A}f + \hat{A}g \tag{7}$$

$$\hat{A}\left(cf\right) = c\hat{A}f \tag{8}$$

Verificando-se que os operadores são lineares, podemos escrever:

$$\left(\hat{A}+\hat{B}\right)\hat{C}=\hat{A}\hat{C}+\hat{B}\hat{C} \tag{9}$$

$$\hat{A}\left(\hat{B}+\hat{C}\right)=\hat{A}\hat{B}+\hat{A}\hat{C} \tag{10}$$

A divição não está definida. Mas temos definida a **inversa do operador** representada por $\hat{A}^{-1}$:

$$\hat{A}\hat{A}^{-1}=\hat{A}^{-1}\hat{A}=\hat{E} \tag{11}$$

$$\hat{A}^{-1}\hat{A}f=\hat{E}f=f \tag{12}$$

Não todos os operadores tem inversa.

Funções próprias e valores próprios

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

$$\hat{A}f\left(x\right) = cf\left(x\right) \tag{13}$$