FI-001 – Mecânica Quântica I

Marcus A.M. de Aguiar
1º semestre de 2008

0. Introdução

Este curso seguirá de perto o livro texto Modern Quantum Mechanics de J.J. SAKURAI. O material principal consta dos quatro primeiros capítulos, que somam 27 tópicos. Veremos então, aproximadamente, um tópico por aula. Muitos desses tópicos já foram vistos pela maioria dos alunos durante a graduação. Isso não implica, no entanto, que não haverão novidades em termos de desenvolvimento teórico: conceitos como integrais de caminho e transformações de Gauge serão introduzidos e os tópicos conhecidos serão revistos de forma mais profunda e sofisticada.

Os capítulos que veremos são:

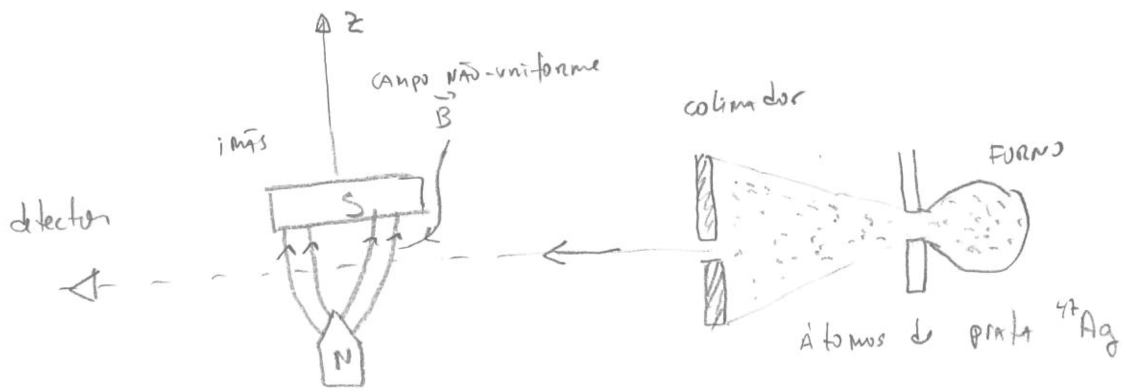
1. Conceitos Fundamentais
2. Dinâmica Quântica
3. Teoria do momento angular
4. Simetrias na mecânica quântica

1. Conceitos Fundamentais

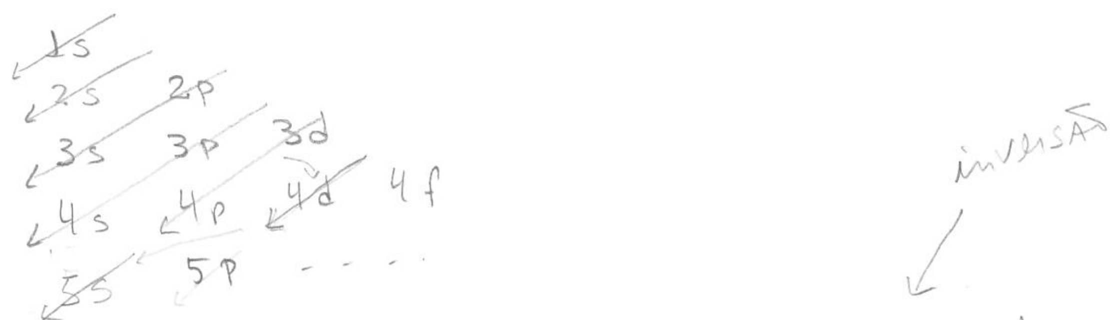
1.1 O experimento de Stern-Gerlach

— Esse experimento ilustra de forma dramática algumas das novas características da teoria quântica, a maioria delas não-intuitivas na perspectiva clássica.

MONTAGEM:



A distribuição dos elétrons no átomo de prata segue a regra de Pauli



$$\underbrace{1s^2\ 2s^2\ 2p^6}_{10}\ \underbrace{3s^2\ 3p^6\ 4s^2}_{10}\ \underbrace{3d^{10}}_{10}\ \underbrace{4p^6}_{6}\ \underbrace{4d^{10}}_{10}\ \underbrace{5s^1}_{1}$$

Os primeiros 46 elétrons formam uma camada fechada com momento angular total zero. O último elétron $5s^1$ tem $l = m = 0$ (nível s). No entanto sabemos que seu spin não é nulo e gera um momento magnético igual a um pequeno ímã:

$$\vec{\mu} = \frac{ge}{mc}\vec{S}$$

Para o elétron $g_e \simeq 1$ e $\vec{\mu} = \frac{e}{mc}\vec{S}$ $(e<0 \text{ sempre})$

Para o próton $g_p \simeq 5.6$ e $\vec{\mu} = \frac{5.6|e|}{M_p c}\vec{S} \simeq 5.6\left(\frac{m_e}{M_p}\right)\vec{\mu}_e << \vec{\mu}_e$.

Para o neutron $g_n \simeq 1.9$

Dessa forma podemos desprezar a interação dos spins nucleares com o campo $\vec{B}$.

Como a energia potencial de interação entre um momento magnético e um campo externo é $V = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$ (veja, por exemplo, Jackson caps. 5.6 e 5.7) a força sobre o átomo é

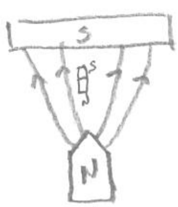
$$\vec{F} = +\nabla(\vec{\mu}\cdot\vec{B}) \simeq \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

desprezando B_x e B_y.

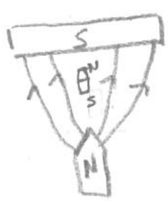
Então, se $\mu_z > 0$ $(S_z < 0)$ a força é para baixo

se $\mu_z < 0$ $(S_z > 0)$ a força é para cima:

$$\frac{\partial B_z}{\partial z} < 0$$

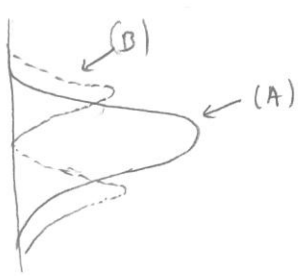


ímã repelido p/ cima, $\mu_z < 0$, $S_z > 0$
(repulsão de baixo é mais intensa)



ímã atraído p/ baixo, $\mu_z > 0$, $S_z < 0$
(atração de baixo é mais intensa)

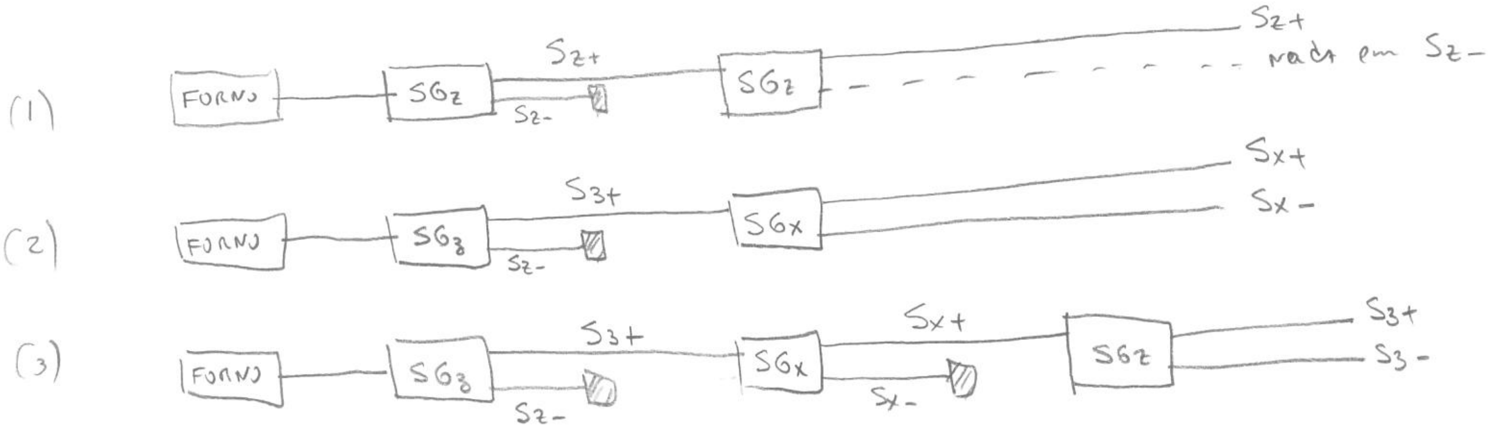
Como os átomos saem do forno com orientação de $\vec{\mu}$ aleatória, a componente μ_z deveria variar de $+|\mu|$ a $-|\mu|$ continuamente e o feixe deveria se abrir como em (A) abaixo. O que é observado é como em (B)



Só dois valores de μ_z são observados correspondentes à $S_z = +\hbar/2$ e $S_z = -\hbar/2$. Chamamos esses estados de S_z+ e S_z-.

$$\hbar = 1.0546 \times 10^{-27} \text{ erg-s}$$

EXPERIMENTOS EM SEQUÊNCIA - Como podemos orientar os imãs na direção que quisermos vamos chamar $\boxed{SG\hat{n}}$ todo o procedimento com imãs na direção $\hat{n}$, que resulta em feixes com S_n+ e S_n-. Considere os três experimentos abaixo onde ▨ representa um absorvedor perfeito de átomos:



(1) mostra que, uma vez filtrados os átomos no estado S_z-, eles não aparecem de novo.

(2) mostra que átomos no estado S_z+ tem também componentes S_x+ e S_x-! Será que 50% dos átomos são do tipo $S_z+ - S_x+$ e 50% $S_z+ - S_x-$?

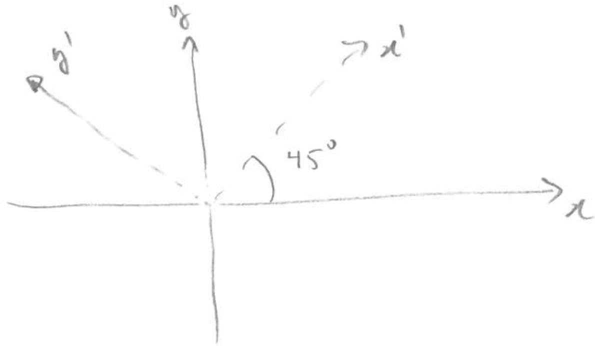
(3) mostra que não. Senão teriam entrado em SG_z no final apenas átomos do tipo $S_z+ - S_x+$ e não poderíamos observar S_z-!

Isso ilustra que S_z e S_x não podem ser medidos simultaneamente. A medida de um deles destroi a informação sobre o outro.

ANALOGIA COM A POLARIZAÇÃO da luz — uma onda de luz monocromática propagando-se na direção z possui campos elétricos e magnéticos oscilantes no plano x-y perpendicular à direção de propagação. A direção do campo elétrico é a direção de polarização. Luz x-polarizada, por exemplo, tem

$$\mathbb{E} = E_0\, \hat{x} \cos(kx - \omega t) \quad ; \quad \omega / k = c$$

Um filtro polaroid na direção $\hat{x}$, ou um x-filtro, deixa passar apenas luz x-polarizada, absorvendo o resto. Considere então as direções $\hat{x}, \hat{y}$ e $\hat{x}', \hat{y}'$ abaixo



$$\begin{cases} \hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}' - \hat{y}') \\ \hat{y} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}' + \hat{y}') \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{x}' = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + \hat{y}) \\ \hat{y}' = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\hat{x} + \hat{y}) \end{cases}$$

e os experimentos

O segundo experimento pode ser entendido porque a luz x-polarizada pode ser escrita como

$$E_0\, \hat{x} \cos(kz - \omega t) = E_0 \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\, \hat{x}' \cos(kz - \omega t) - \frac{\hat{y}'}{\sqrt{2}} \cos(kz - \omega t) \right).$$

Ao passar por x'-filtro sobra

$$\frac{E_0}{\sqrt{2}}\, \hat{x}' \cos(kz - \omega t) = E_0 \left(\frac{1}{2} \hat{x} \cos(kz - \omega t) + \frac{1}{2} \hat{y} \cos(kz - \omega t) \right)$$

Ao passar por y-filtro ainda sobra $\frac{E_0}{2}\, \hat{y} \cos(kz - \omega t)$, portanto 1/4 da intensidade apenas.

Essa situação é totalmente semelhante ao experimento SG.
Podemos então conjecturar a existência de dois estados

$$|S_z;+\rangle \quad e \quad |S_z;-\rangle$$

e dois estados $|S_x;+\rangle$ e $|S_x;-\rangle$ tal que

$$|S_x;+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z;+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z;-\rangle$$

fazendo o papel de $\hat{x}'$ e

$$|S_x;-\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}|S_z;+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z;-\rangle$$

fazendo o papel de $\hat{y}'$. E quanto à $|S_y;+\rangle$ e $|S_y;-\rangle$?
Já usamos as duas combinações lineares independentes possíveis! Lembramos então da luz circularmente polarizada:

$$\mathbb{E} = E_0\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{x}\cos(kz-\omega t) + \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{y}\cos(kz-\omega t \pm \pi/2)\right]$$

↑ defasada!

escrevendo $\quad Re(\mathcal{E}) = \mathbb{E}/E_0$

$$\mathcal{E} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\hat{x}e^{i(kz-\omega t)} \pm i\hat{y}e^{i(kz-\omega t)}\right]$$

Temos então mais duas combinações lineares independentes se o espaço de estados for complexo. Podemos então associar

$$|S_y;\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z;+\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}}|S_z;-\rangle .$$

Essas expressões serão formalizadas adiante com a teoria dos momentos angulares.

1.2 - Kets, Bras e Operadores

Na mecânica quântica, o estado de um sistema é descrito por um vetor $|\alpha\rangle$ = ket(*). A dimensão N do espaço vetorial depende do sistema em questão. Vamos considerar primeiramente espaços finitos ou infinitos mas enumeráveis. Como vimos no SG, o espaço vetorial deve ser complexo.

__Propriedades__

1) Dois kets podem ser somados: $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle$. O resultado é outro ket.
2) Mutip. por nº complexo: $c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c$ = ket
   para $c=0$ $c|\alpha\rangle$ = ket nulo.

Observáveis são representados por operadores no espaço vetorial(**), agindo pela esquerda

$$A\cdot(|\alpha\rangle) \equiv A|\alpha\rangle = \text{outro ket}.$$

Os autokets do operador A satisfazem a equação de auto-valores

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle$$
$$A|a''\rangle = a''|a''\rangle$$
etc

onde a', a'' são números, chamados de autovalores de A

Os N autokets de um operador A (se eles existirem e forem L.I.) formam uma base e

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} C_{a'}|a'\rangle$$

__ESPAÇO DOS BRAS e PRODUTO INTERNO__ - A cada ket $|\alpha\rangle$ associamos um bra $\langle\alpha|$, assim como associamos um vetor linha à cada vetor coluna. Essa associação é chamada de correspondência Dual e o espaço vetorial dos bras é o espaço dual dos kets.

(*) 1º POSTULADO (ver COHEN)
(**) 2º POSTULADO

POSTULADO : $c|\alpha\rangle \xleftrightarrow{DC} c^*\langle\alpha|$

PRODUTO INTERNO ENTRE UM BRA E UM KET $\langle\beta|\alpha\rangle = (\langle\beta|)\cdot(|\alpha\rangle)$

POSTULADOS : (1) $\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$

consequência : $\langle\alpha|\alpha\rangle$ = real

(2) $\langle\alpha|\alpha\rangle \geqslant 0$ com $\langle\alpha|\alpha\rangle = 0$ só se $|\alpha\rangle = 0$

ORTOGONALIDADE : Dois kets $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ são ortogonais se

$$\langle\beta|\alpha\rangle = 0$$

NORMA : $\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}$ = norma de $|\alpha\rangle$

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}}|\alpha\rangle$$ = versão normalizada de $|\alpha\rangle$

Um dos postulados da mecânica quântica é que $|\alpha\rangle$ e $|\tilde{\alpha}\rangle$ representam o mesmo estado físico. Podemos então trabalhar apenas com estados normalizados. Esse subconjunto é chamado de "espaço dos raios".

OPERADORES : Agem pela esquerda nos kets e pela direita nos bras :

$X|\alpha\rangle$ = outro ket

$\langle\alpha|X$ = outro bra → veja pag. 10 p/ definição

Em geral $\langle\alpha|X$ não é o correspondente de $X|\alpha\rangle$. Define-se outro operador $X^\dagger$ = Adjunto de X tal que

$$X|\alpha\rangle \xleftrightarrow{DC} \langle\alpha|X^\dagger$$

Se $X = X^{+}$ o operador é dito Hermiteano.

PROPRIEDADES
- $X + Y = Y + X$
- $X + (Y + Z) = (X + Y) + Z$
- $X\left(c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle\right) = c_\alpha X|\alpha\rangle + c_\beta X|\beta\rangle$ (linearidade)
- $XY \neq YX$ em geral
- $X(YZ) = (XY)Z$
- $(XY)^{+} = Y^{+}X^{+}$ (prove!)

PRODUTO EXTERIOR $\quad |\alpha\rangle\langle\beta| =$ operador

Definição $\quad \left(|\alpha\rangle\langle\beta|\right)|\gamma\rangle \equiv |\alpha\rangle\left(\langle\beta|\gamma\rangle\right)$

OBS Produto "ilegais", que não fazem sentido:

$|\alpha\rangle X$

$X\langle\beta|$

$|\alpha\rangle|\beta\rangle$

$\langle\alpha|\langle\beta|$

O AXIOMA ASSOCIATIVO : TODOS os produtos legais são associativos.

Exemplos:

- $\left(|\alpha\rangle\langle\beta|\right)|\gamma\rangle = |\alpha\rangle\left(\langle\beta|\gamma\rangle\right) = |\alpha\rangle\langle\beta|\gamma\rangle \Rightarrow |\alpha\rangle\langle\beta|$ projeta $|\gamma\rangle$ na direção de $|\alpha\rangle$.

Como $\left(|\alpha\rangle\langle\beta|\right)|\gamma\rangle =$ ket , $|\alpha\rangle\langle\beta| =$ operador

• Se $X = |\alpha\rangle\langle\beta|$ então $X^\dagger = |\beta\rangle\langle\alpha|$ (prove!)

• $(\langle\beta|)\cdot(X|\alpha\rangle) = (\langle\beta|X)|\alpha\rangle \Rightarrow$ usamos $\langle\beta|X|\alpha\rangle$

Na verdade podemos tomar essa propriedade como definição de $\langle\beta|X$.

• $\langle\beta|X|\alpha\rangle = (\langle\beta|)\cdot(X|\alpha\rangle) = \left\{(\langle\alpha|X^\dagger)|\beta\rangle\right\}^* = \langle\alpha|X^\dagger|\beta\rangle^*$

é uma equação que permite calcular $X^\dagger$ dado X. Se X for hermiteano $\langle\beta|X|\alpha\rangle = \langle\alpha|X|\beta\rangle^*$.

1.3 Bases e Representações Matriciais

Teorema: Os auto-valores de um operador hermiteano A são reais e seus autokets ortogonais.

Prova

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle \qquad \rightarrow * \langle a''|$$
$$A|a''\rangle = a''|a''\rangle \longrightarrow \langle a''|A = a''^*\langle a''| \rightarrow * |a'\rangle$$

$$\begin{cases} \langle a''|A|a'\rangle = a'\langle a''|a'\rangle \\ \langle a''|A|a'\rangle = a''^*\langle a''|a'\rangle \end{cases} \Rightarrow (a' - a''^*)\langle a''|a'\rangle = 0$$

• se $a' = a''$ $\langle a'|a''\rangle \neq 0$ e $a' = a'^* =$ real

• se $a' \neq a''$ então $(a' - a'') \neq 0$ e $\langle a''|a'\rangle = 0$

Normalizando esses autoestados podemos escrever $\langle a'|a''\rangle = \delta_{a'a''}$

Vamos supor que os auto-estados de A formem um base no espaço de kets. Ou, vamos assumir que o espaço de kets em questão é o espaço gerado por esses autokets. Então para qualquer vetor $|\alpha\rangle$ temos

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'}|a'\rangle \longrightarrow c_{a'} = \langle a'|\alpha\rangle$$

e $|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle = \left[\sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\right]|\alpha\rangle$ e

$$\boxed{\sum_{a'} |a'\rangle\langle a'| = 1}$$ Relação de completeza

Usando essa relação podemos mostrar facilmente que

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \sum_{a'} |\langle a'|\alpha\rangle|^2$$

Se $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ então $\sum_{a'} |\langle a'|\alpha\rangle|^2 = \sum_{a'} |c_{a'}|^2 = 1$. Veja que o

operador

$$\Lambda_{a'} = |a'\rangle\langle a'|$$

é um projetor na direção do ket $|a'\rangle$, pois $\Lambda_{a'}|\alpha\rangle = (\langle a'|\alpha\rangle)\,|a'\rangle$.

Representações de Operadores por Matrizes. Usando a relação de completeza

podemos escrever

$$X = \sum_{a',a''} |a''\rangle\langle a''|X|a'\rangle\langle a'| = \sum_{a'a''} \left[\langle a''|X|a'\rangle\right] |a''\rangle\langle a'|$$

Os N^2 elementos $\langle a''|X|a'\rangle$ podem ser ordenados em uma matriz quadrada

$$X \doteq \begin{bmatrix} \langle a^{(1)}|X|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(1)}|X|a^{(2)}\rangle & \cdots & \langle a^{(1)}|X|a^{(N)}\rangle \\ \vdots & & & \\ & & & \langle a^{(N)}|X|a^{(N)}\rangle \\ \langle a^{(N)}|X|a^{(1)}\rangle & \cdots & & \end{bmatrix}$$

Veja que:

(a) $\langle a''|X^{+}|a'\rangle = \langle a'|X|a''\rangle^{*}$ $\Rightarrow$ A matriz de X^{+} é a transposta conjugada da matriz de X

(b) Se B é hermitiano $\langle a''|B|a'\rangle = \langle a'|B|a''\rangle^{*}$

(c) Se $A|a'\rangle = a'|a'\rangle$ $\quad \langle a''|A|a'\rangle = a'\,\delta_{a'a''}$ e

$$\boxed{A = \sum_{a'} a'\,|a'\rangle\langle a'|} = \sum_{a'} a'\,\Lambda_{a'}$$

Finalmente, representamos kets por vetores coluna e bras por vetores linha:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} \left(\langle a'|\alpha\rangle\right) |a'\rangle \qquad \langle\alpha| = \sum_{a'} \left(\langle\alpha|a'\rangle\right) \langle a'|$$

$$|\alpha\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\alpha\rangle \\ \vdots \\ \langle a^{(N)}|\alpha\rangle \end{pmatrix} \qquad \langle\alpha| \doteq \left(\langle a'|\alpha\rangle^* \cdots \langle a^{(N)}|\alpha\rangle \right)$$

Com essas associações mostramos que se

(a) $Z = XY \rightarrow$ a matriz de Z é o produto das matrizes de X e Y

(b) $|\gamma\rangle = X|\alpha\rangle \rightarrow$ o vetor de $|\gamma\rangle$ é o produto da matriz de X pelo vetor de $|\alpha\rangle$

(c) $\langle\gamma| = \langle\alpha| X \rightarrow$ o vetor linha de $\langle\gamma|$ é o produto do vetor linha de $\langle\alpha|$ vezes a matriz de X.

<u>Exemplo</u> sistema com spin 1/2 $\quad |S_3; \pm\rangle \equiv |\pm\rangle$

$$S_3|+\rangle = \hbar/2\, |+\rangle$$
$$S_3|-\rangle = -\hbar/2\, |-\rangle$$

$$1 = |+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|$$

$$|+\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad S_3 = \frac{\hbar}{2}\left[|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-| \right]$$

$$|-\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad S_3 \doteq \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$S_+ \equiv \hbar\, |+\rangle\langle-| \qquad \rightarrow \qquad S_+|-\rangle = \hbar|+\rangle \qquad S_+|+\rangle = 0$$
$$S_- \equiv \hbar\, |-\rangle\langle+| \qquad\qquad S_-|-\rangle = 0 \qquad S_-|+\rangle = \hbar|-\rangle$$

$$S_+ \doteq \begin{pmatrix} 0 & \hbar \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad S_- \doteq \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hbar & 0 \end{pmatrix}$$

1.4 - MEDIDAS, OBSERVÁVEIS E RELAÇÕES DE INCERTEZA

"Uma medida sempre faz com que o sistema salte para um auto-estado da variável dinâmica sendo medida" - DIRAC.

Suponha que vamos medir o observável A. Então, antes da medida, escrevemos

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle$$

O resultado da medida é um dos autovalores de $A^{(*)}$, que são mutuamente exclusivos: só podemos medir um deles. Se o resultado for a' então $^{(**)}$

$$|\alpha\rangle \longrightarrow |a'\rangle \quad \text{após a medida.}$$

A probabilidade do resultado a' ser medido é postulada como $^{(***)}$

$$\mathcal{P}(a') = |\langle a'|\alpha\rangle|^2$$

se $|\alpha\rangle$ estiver normalizado. A medida experimental de $\mathcal{P}(a')$ requer várias medidas sobre um ensemble de estados $|\alpha\rangle$ idênticos.

O <u>valor esperado</u> (ou valor médio) de A é definido como

$$\langle A\rangle = \langle\alpha|A|\alpha\rangle = \sum_{a'} \langle\alpha|A|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle = \sum_{a'} a' \mathcal{P}(a')$$

Introduzimos ainda o conceito de <u>MEDIDA SELETIVA</u>. Imagine um aparato do tipo SG onde o estado $|\alpha\rangle$ é separado em suas possíveis componentes $|a'\rangle$ e onde todas, exceto uma, são bloqueadas:

(*) TERCEIRO POSTULADO DA MEC. QUÂNTICA (VER COHEN); (**) QUINTO POSTULADO (COLAPSO DA FUNÇÃO DE ONDA)
(***) QUARTO POSTULADO

Esse medidor corresponde à aplicação de $\Lambda_{a'} = |a'\rangle\langle a'|$ em $|\alpha\rangle$:

$$\Lambda_{a'}|\alpha\rangle = |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle$$

Vamos agora usar os resultados das medidas SG para construir os operadores S_x e S_y e seus auto-estados. Em primeiro lugar notamos que, dado um feixe de átomos no estado $|S_z,+\rangle$ (um estado puro), se ele passar por um SG $\hat{x}$ (ou um SG $\hat{y}$), a probabilidade de obtermos $|S_x,+\rangle$ ou $|S_x,-\rangle$ é $1/2$. Isso vale p/ qualquer feixe puro passando por um SG perpendicular. Então:

$$|\langle +|S_x;+\rangle| = |\langle -|S_x;+\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$|\langle +|S_x;-\rangle| = |\langle -|S_x;-\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$|\langle S_y;\pm|S_x,+\rangle| = |\langle S_y;\pm|S_x,-\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Podemos então escrever

$$\left.\begin{aligned} |S_x,+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_1}|-\rangle \\ |S_x,-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_1}|-\rangle \end{aligned}\right\} \text{ortogonais}$$

$$|S_y;\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm e^{i\delta_2}|-\rangle \quad \Big\} \text{ IDEM}$$

Usamos agora a terceira das relações acima:

$$|\langle S_y \pm | S_x + \rangle| = \frac{1}{2}\left|\left[\langle +| \pm e^{-i\delta_2}\langle -|\right]\left[|+\rangle + e^{+i\delta_1}|-\rangle\right]\right|$$

$$= \frac{1}{2}\left|1 \pm e^{i(\delta_1-\delta_2)}\right| = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \delta_2 - \delta_1 = \pm \pi/2$$

pois $\frac{1}{2}\left|1 \pm e^{\mp i\pi/2}\right| = \frac{1}{2}|1 \mp i| = \frac{1}{2}\sqrt{1+1} = \frac{1}{\sqrt{2}}$

A escolha convencional é $\delta_1 = 0$ e $\delta_2 = \pi/2$ p/ que x-y-z seja um sistema de mão direita. Assim:

$$|S_x; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle$$

$$|S_y; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle$$

$$S_x = \frac{\hbar}{2}|S_x+\rangle\langle S_x+| - \frac{\hbar}{2}|S_x-\rangle\langle S_x-|$$

$$= \frac{\hbar}{4}\left[|+\rangle + |-\rangle\right]\left[\langle +| + \langle -|\right] - \frac{\hbar}{4}\left[|+\rangle - |-\rangle\right]\left[\langle +| - \langle -|\right]$$

$$= \frac{\hbar}{2}\left[|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|\right] = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2}\left[-i|+\rangle\langle -| + i|-\rangle\langle +|\right] = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Outras definições e propriedades que você deve provar

1) $S_\pm = S_x \pm iS_y$ (veja pg. 12)
2) $[S_i, S_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk} S_k$ onde $[A,B] \equiv AB - BA$ é o comutador
3) $\{S_i, S_j\} = \frac{\hbar^2}{2}\delta_{ij}$ onde $\{A,B\} = AB + BA$ é o anti-comutador
4) $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_3^2 = \left(\frac{3}{4}\right)\hbar^2 \mathbb{1}$
5) $[S^2, S_i] = 0$

OBSERVÁVEIS COMPATÍVEIS . A e B são compatíveis se $[A, B] = 0$.

TEOREMA – Se A e B são compatíveis, $\langle a''|B|a'\rangle$ podem ser colocados de forma diagonal. Nessa forma os auto-estados $|a'\rangle$ de A t.b. são auto-estados de B com $b' = \langle a'|B|a'\rangle \Rightarrow$ usaremos a denominação $|a'b'\rangle$.

PROVA 1 Se os autovalores de A forem não degenerados, então

$$\langle a''|[A,B]|a'\rangle = (a''-a')\langle a''|B|a'\rangle \equiv 0$$

$$\Rightarrow \text{ se } a'' \neq a' \quad \langle a''|B|a'\rangle = 0$$

Escrevendo $B = \sum_{a', a''} |a'\rangle\langle a'|B|a''\rangle\langle a''| = \sum_{a''} |a''\rangle\langle a''|B|a''\rangle\langle a''|$

vemos que $B|a'\rangle = |a'\rangle \underbrace{\langle a'|B|a'\rangle}_{\text{AUTO-VALOR}}$.

PROVA 2 Suponha que o autovalor a' tenha degenerescência m, t.q. que

$$A|a'^{(j)}\rangle = a'|a'^{(j)}\rangle \qquad j = 1, 2, \dots m$$

$$\langle a'^{(j)}|a'^{(i)}\rangle = \delta_{ij} \qquad (*)$$

Então qualquer combinação linear dos $|a'^{(j)}\rangle$ t.b. é autoestado de A com o mesmo autovalor a' (PROVE!)

Nesse caso $\langle a'^{(j)}|[A,B]|a'^{(i)}\rangle = 0$ sempre e $\langle a'^{(j)}|B|a'^{(i)}\rangle$ não serão proporcionais à δ_{ij}.

A matriz de B na base $|a\rangle$ terá a forma

(*) Note que dar o autovalor de A não especifica um estado quando há degenerescências.

$$
B \doteq \left[\begin{array}{ccc|c|c}
\langle a'^{(1)}|B|a'^{(1)}\rangle & \cdots & \langle a'^{(1)}|B|a'^{(m)}\rangle & & \\
\vdots & & & 0 & \\
\langle a'^{(m)}|B|a'^{(1)}\rangle & \cdots & \langle a'^{(m)}|B|a'^{(m)}\rangle & & \\
\hline
 & & & \langle a''|B|a''\rangle & \\
\hline
 & 0 & & & \langle a'''|B|a'''\rangle \\
 & & & &
\end{array}\right]
$$

O bloco $m \times m$ pode agora ser diagonalizado. Os autovalores serão $b'^{(1)}, b'^{(2)}, \dots, b'^{(m)}$ e os autovetores serão combinações lineares dos $|a'^{(i)}\rangle$, que chamaremos de $|\bar{a}'^{(j)}\rangle$ $j = 1, \dots m$. Como eles são autovetores de A e B, se usarmos $|\bar{a}^j\rangle$ em vez de $|a'^{(j)}\rangle$ ambas as matrizes serão diagonais.

Podemos então usar a notação $|a'b'\rangle$ tal que

$$A|a'b'\rangle = a'|a'b'\rangle$$
$$B|a'b'\rangle = b'|a'b'\rangle$$

Note que os autovalores $b'^{(j)}$ ainda podem conter degenerescências e, nesse caso, dar um par de autovalores a' e b' não especifica um único estado. Podemos então buscar um terceiro operador t.q. $[A,B] = [A,C] = [B,C] = 0$ t.q. dada uma tripla de autovalores a', b', c' corresponde à um único estado $|a', b', c'\rangle$. O conjunto mínimo de operadores que comutam com essa propriedade é dito um CCOC (conjunto completo de observáveis que comutam)

Chamando $|k'\rangle \equiv |a', b', c' \ldots\rangle$ coletivamente,

$$\langle k''|k'\rangle = \delta_{k'k''} = \delta_{a'a''}\,\delta_{b'b''} \ldots$$

$$\sum_{k'} |k'\rangle\langle k'| = \sum_{a',b',c'} |a'b'c' \ldots\rangle\langle a'b'c' \ldots| = 1$$

Note que o número de termos da soma é N, a dimensão do espaço.

Exemplo p/ $N=3$

$$A \doteq \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad B \doteq \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \qquad C \doteq \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}$$

triplamente degenerado

Dizer que $a=1$ e $b=2$ não especifica um auto-vetor, que pode ser $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ ou $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Quando dizemos que $a=1, b=2, c=4$, só pode ser o $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$. Os vetores são:

$$|1\,2\,4\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|1\,2\,5\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|1\,3\,4\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

A e B não formam um CCOC, mas A, B, C sim.

Outro exemplo são os autoestados de L^2 e L_3, dados por $|l\,m\rangle$ com $-l < m < +l$.

Finalmente consideramos a sequência de medidas

$$|\alpha\rangle \xrightarrow[a']{A \text{ é medido}} |a'b'\rangle \xrightarrow[b']{B \text{ medido}} |a'b'\rangle \xrightarrow[a']{A \text{ é medido}} |a'b'\rangle$$

A medida intermediária de B não afeta um novo resultado a'. Veja que se a' for degenerado teremos

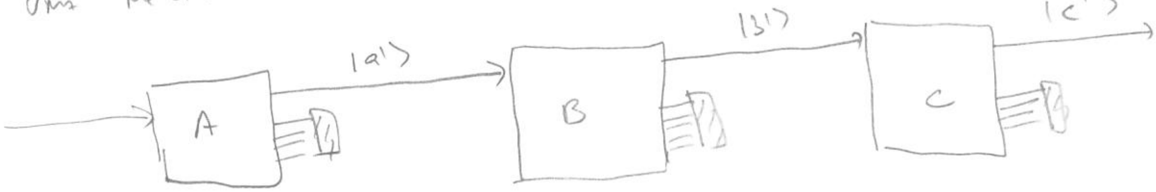
$$|\alpha\rangle \xrightarrow[a']{A} \sum_j c_j |a', b'^{(j)}\rangle \xrightarrow[b'^{k}]{B} \sum_{j'} c_{j'} |a', b'^{(k)}\rangle \xrightarrow[a']{A} \sum_{j'} c_{j'} |\rangle$$

comb. linear de est. degenerados

seleciona um dos b'

mesmo estado anterior.

<u>OBSERVÁVEIS INCOMPATÍVEIS</u> se $[A,B] \neq 0$. Nesse caso não há um conj. completo (base) de autoestados comuns. Nesse caso, fazer uma medida intermediária muda a medida seguinte:



Começando com $|a'\rangle$, a prob. de medir b' e depois c' é

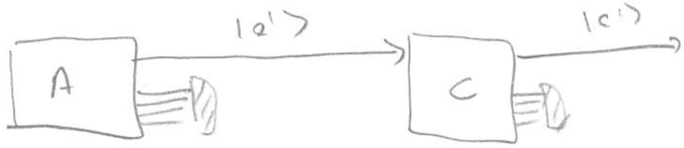
$$|\langle b'|a'\rangle|^2 |\langle c'|b'\rangle|^2$$

Trocando o canal seletor de b' podemos repetir a experiência somando sobre todos b':

$$\sum_{b'} |\langle b'|a'\rangle|^2 |\langle c'|b'\rangle|^2 = \sum_{b'} \langle c'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle\langle a'|b'\rangle\langle b'|c'\rangle$$

Note que se $C = A$, a prob. da segunda medida com $c' = a'$ não é 1, mas $|\langle b'|a'\rangle|^4$.

Tirando o medidor B teríamos



e $$P(c') = |\langle c'|a'\rangle|^2 = \Big|\sum_{b'} \langle c'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle\Big|^2$$

$$= \sum_{b'b''} \langle c'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle\langle a'|b''\rangle\langle b''|c'\rangle$$

Note que se $[A,B]=0$ então (sem degenerescências) $|b'\rangle = |a'b'\rangle$, $\langle b'|a'\rangle = 1$ e a 1ª experiência fica $\sum_{b'} |\langle c'|b'\rangle|^2$. Como $\langle a'|b''\rangle = \delta_{b''b'}$ a 2ª fica $\sum_{b'} \langle c'|b'\rangle\langle b'|c'\rangle$ e recuperamos a igualdade.

<u>RELAÇÕES DE INCERTEZA</u> — Dados dois observáveis A e B definimos

$$\Delta A = A - \langle A\rangle \quad ; \quad \Delta B = B - \langle B\rangle$$

$\langle(\Delta A)^2\rangle =$ dispersão de A no estado em questão

$\langle(\Delta B)^2\rangle =$ " B " "

Então

$$\boxed{\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2}$$

A prova é baseada em 3 lemas:

1- Desigualdade de Schwarz

$$\left[\langle\alpha| + \lambda^*\langle\beta|\right]\left[|\alpha\rangle + \lambda|\beta\rangle\right] \geq 0$$

$$\langle\alpha|\alpha\rangle + |\lambda|^2\langle\beta|\beta\rangle + \lambda\langle\alpha|\beta\rangle + \lambda^*\langle\beta|\alpha\rangle \geq 0$$

p/ $\lambda = -\frac{\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}$ obtemos

$$\langle\alpha|\alpha\rangle + \cancel{\frac{|\langle\beta|\alpha\rangle|^2}{\langle\beta|\beta\rangle}} - \cancel{\frac{|\langle\alpha|\beta\rangle|^2}{\langle\beta|\beta\rangle}} - \frac{|\langle\alpha|\beta\rangle|^2}{\langle\beta|\beta\rangle} \geq 0$$

$$\boxed{\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \geq |\langle\alpha|\beta\rangle|^2}$$

2- O valor esperado de um operador Hermiteano é sempre real (os autovalores são reais)

3- O valor esperado de um operador Anti-hermiteano é sempre imaginário puro (para $C^\dagger = -C$ os autovalores são imaginários puro). A prova fica como exercício.

Então, seja $|\psi\rangle$ um estado qualquer e $|\alpha\rangle \equiv \Delta A|\psi\rangle$, $|\beta\rangle \equiv \Delta B|\psi\rangle$

Usando Schwarz:

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq |\langle\psi|\Delta A\Delta B|\psi\rangle|^2 = |\langle\Delta A\Delta B\rangle|^2$$

$$\Delta A\Delta B = \frac{1}{2}[\Delta A, \Delta B] + \frac{1}{2}\{\Delta A, \Delta B\}$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2}[A, B]}_{\text{Anti-Hermiteano}} + \underbrace{\frac{1}{2}\{\Delta A, \Delta B\}}_{\text{Hermiteano}} \quad \text{(prove!)}$$

$$\Rightarrow |\langle\Delta A\Delta B\rangle|^2 = \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2 + \frac{1}{4}|\langle\{\Delta A,\Delta B\}\rangle|^2$$

o que prova a desigualdade, pois podemos jogar fora o último termo.

A aplicação da relação de incerteza pode parecer um pouco estranha para sistemas finitos. Considere por exemplo os operadores S_z e S_x, com $[S_z, S_x] = i\hbar S_y$. Então

$$\langle \Delta S_z^2 \rangle \langle \Delta S_x^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} | \langle S_y \rangle |^2$$

Tomando o estado $|+\rangle$ para fazer as médias vemos que $\langle \Delta S_z^2 \rangle = 0$ o que parece implicar $\langle \Delta S_x^2 \rangle = \infty$. Mas como isso é possível em um espaço de dimensão 2? Veja que

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad S_x^2 = \frac{\hbar^2}{4} \mathbb{1}$$

de forma que $\langle + | S_x | + \rangle = 0$ e $\langle + | S_x^2 | + \rangle = \hbar^2/4 \Rightarrow$

$$\langle \Delta S_x^2 \rangle = \hbar^2/4$$ que é finito.

O que ocorre nesse caso é que $\langle S_y \rangle = \langle + | S_y | + \rangle = 0$ e temos, para o estado $|+\rangle$,

$$\langle \Delta S_z^2 \rangle \langle \Delta S_x^2 \rangle \geq 0$$ e

não temos informação sobre $\langle \Delta S_x^2 \rangle$.

1.5 Mudança de Bases

Considere dois observáveis A e B e seus conjuntos de auto-estados formando bases no espaço de estados:

$$A|a^l\rangle = a^l |a^l\rangle \quad \longrightarrow \quad \sum_l |a^l\rangle\langle a^l| = 1$$

$$B|b^k\rangle = b^k |a^k\rangle \quad \longrightarrow \quad \sum_k |a^k\rangle\langle a^k| = 1$$

TEOREMA O operador $U = \sum_k |b^k\rangle\langle a^k|$ é unitário, $UU^\dagger = U^\dagger U = 1$ e leva cada ket $|a^l\rangle$ no ket $|b^l\rangle$, $U|a^l\rangle = |b^l\rangle$.

PROVA

$$UU^\dagger = \sum_{k,l} |b^k\rangle\underbrace{\langle a^k|a^l\rangle}_{\delta_{kl}}\langle b^l| = \sum_k |b^k\rangle\langle b^k| = 1$$

$$U|a^l\rangle = \sum_k |b^k\rangle\underbrace{\langle a^k|a^l\rangle}_{\delta_{kl}} = |b^l\rangle$$

A matriz de transformação de $|a^l\rangle$ para $|b^l\rangle$ é definida por

$$\langle a^k|U|a^l\rangle = \langle a^k|b^l\rangle$$

PROPRIEDADES

1) Se $|\alpha\rangle = \sum_l |a^l\rangle\langle a^l|\alpha\rangle = \sum_k |b^k\rangle\langle b^k|\alpha\rangle$ então

$$\langle b^k|\alpha\rangle = \langle a^k|U^\dagger|\alpha\rangle = \sum_l \langle a^k|U^\dagger|a^l\rangle\langle a^l|\alpha\rangle$$

ou, em notação de vetores e matrizes: $\alpha'_k = U_{kl}\,\alpha_l$

$$\alpha' = U\alpha$$

2) Para um operador, $X = \sum_{k,l} |a^k\rangle\langle a^k|X|a^l\rangle\langle a^l|$

$= \sum_{k,l} |b^k\rangle\langle b^k|X|b^l\rangle\langle b^l|$

temos

$$\langle b^k|X|b^l\rangle = \sum_{m,n} \langle b^k|a^m\rangle\langle a^m|X|a^n\rangle\langle a^n|b^l\rangle$$

$$= \sum_{m,n} \langle a^k|U^\dagger|a^m\rangle\langle a^m|X|a^n\rangle\langle a^n|U|a^l\rangle \quad \text{ou}$$

$$X'_{kl} = \sum_{m,n} U^\dagger_{km} X_{mn} U_{nl}$$

$$\downarrow$$

$$X' = U^\dagger X U \quad = \text{transf. de similaridade}$$

3) $tr(X) \equiv \sum_l \langle a^l|X|a^l\rangle = \sum_{l,m,n} \langle a^l|b^m\rangle\langle b^m|X|b^n\rangle\langle b^n|a^l\rangle$

$$= \sum_{m,n} \langle b^n|\underbrace{\left(\sum_l |a^l\rangle\langle a^l|\right)}_{1}|b^m\rangle\langle b^m|X|b^n\rangle$$

$$= \sum_{m,n} \langle b^n|b^m\rangle\langle b^m|X|b^n\rangle = \sum_n \langle b^n|X|b^n\rangle$$

$\Rightarrow$ o traço é independente da base

4) $tr(XY) = tr(YX)$

5) $tr(U^\dagger X U) = tr(X)$ (segue de 4)

6) $tr(|a'\rangle\langle a''|) = \delta_{a'a''}$

7) $tr(|b'\rangle\langle a'|) = \langle a'|b'\rangle$

Exemplos

(1) $A = S_z$; $B = S_x$

$|a_1\rangle = |+\rangle$ $\qquad |b_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle + |-\rangle]$

$|a_2\rangle = |-\rangle$ $\qquad |b_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle - |-\rangle]$

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle+|\right] + \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+\rangle\langle-| - |-\rangle\langle-|\right]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle+| + |+\rangle\langle-| - |-\rangle\langle-|\right] \doteq \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$U^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ +1 & -1 \end{pmatrix} = U^{\dagger} = U$$

$$UAU^{-1} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{4}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{4}\begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = S_x$$

$$\Rightarrow \boxed{UAU^{-1} = B}$$

(2) $A = S_3$; $B = S^2$

$|a_1\rangle = |b_1\rangle = |+\rangle$

$|a_2\rangle = |b_2\rangle = |-\rangle$

$$U = |+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-| = \mathbb{1}$$

$$UAU^{-1} = 1S_3 1 = S_z$$

$$\Rightarrow \boxed{UAU^{-1} \neq B}$$

como deveria ser, pois A e B tem espectros diferentes.

Observáveis Unitariamente Equivalentes

Seja $A|a^\ell\rangle = a^\ell|a^\ell\rangle$ e

$$B|b^\ell\rangle = b^\ell|b^\ell\rangle$$

com $U = \sum_k |b^k\rangle\langle a^k|$ t.q. $U|a^\ell\rangle = |b^\ell\rangle$

Então A e UAU^{-1} são ditas unitariamente equivalentes e possuem o mesmo espectro. PROVA

$$UA|a^\ell\rangle = a^\ell U|a^\ell\rangle$$

$$(UAU^{-1})(U|a^\ell\rangle) = a^\ell(U|a^\ell\rangle) \Rightarrow (UAU^{-1})|b^\ell\rangle = a^\ell|b^\ell\rangle$$

$\Rightarrow$ UAU^{-1} tem o mesmo espectro que A, com autovetores $U|a^\ell\rangle = |b^\ell\rangle$.
Em geral $UAU^{-1} = B$. Note que isso NÃO implica que $[A,B]=0$! (S_x e S_y tem o mesmo espectro e estão ligados por uma rotação; no entanto $[S_x, S_y] \neq 0$).

1.6 Operadores de Posição, Momento e Translação

Espectro Contínuo - Em muitos problemas de Mec. Quântica a dimensão do espaço dos Kets é infinita e existem operadores com espectro contínuo. As propriedades da bases discretas são levadas às bases contínuas com pequenas alterações. Se

$$\underset{\substack{\uparrow\\ \text{operador}}}{\xi}|\xi'\rangle = \underset{\substack{\uparrow\\ \text{número (real ou complexo)}}}{\xi'}|\xi'\rangle$$

então:

$$\langle a'|a''\rangle = \delta_{a'a''} \longrightarrow \langle \xi'|\xi''\rangle = \delta(\xi'-\xi'')$$

$$\sum_{a'} |a'\rangle\langle a'| = 1 \longrightarrow \int |\xi'\rangle\langle\xi'|\,d\xi' = 1$$

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle \longrightarrow |\alpha\rangle = \int d\xi'\,|\xi'\rangle\langle\xi'|\alpha\rangle$$

$$\sum_{a'} |\langle a'|\alpha\rangle|^2 = 1 \longrightarrow \int |\langle\xi'|\alpha\rangle|^2\,d\xi' = 1$$

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \sum_{a'} \langle\beta|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle \longrightarrow \langle\beta|\alpha\rangle = \int d\xi'\,\langle\beta|\xi'\rangle\langle\xi'|\alpha\rangle$$

$$\langle a''|A|a'\rangle = a'\,\delta_{a'a''} \longrightarrow \langle\xi''|\xi|\xi'\rangle = \xi'\,\delta(\xi'-\xi'')$$

A mudança mais significativa é na normalização, onde $\delta_{a'a''} \to \delta(\xi'-\xi'')$.

POSIÇÃO – o operador de posição x em 1-D tem espectro contínuo, pois uma partícula pode ser encontrada em qualquer lugar. Escrevemos

$$x|x'\rangle = x'|x'\rangle$$

$$|\alpha\rangle = \int dx'\,|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle$$

Em um processo de medida montamos um detector que "CLICA" se a partícula estiver no intervalo $(x'-\Delta/2,\ x'+\Delta/2)$. Se o estado inicial for $|\alpha\rangle$, após a medida será

$$\int_{x'-\Delta/2}^{x'+\Delta/2} dx''\,|x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle$$

Esse estado não está mais normalizado e precisamos normalizá-lo antes de qualquer outro cálculo. Faça isso como exercício.

A probabilidade do clic ocorrer é

$$\int_{x'-\Delta/2}^{x'+\Delta/2} |\langle x''|\alpha\rangle|^2\,dx'$$

e $|\langle x'|\alpha\rangle|^2 =$ densidade de probabilidade.

Em 3-D temos os operadores x, y e z e

$$|\mathbf{x}'\rangle = |x'y'z'\rangle \quad \text{com}$$

$$x|\mathbf{x}'\rangle = x'|\mathbf{x}'\rangle$$
$$y|\mathbf{x}'\rangle = y'|\mathbf{x}'\rangle$$
$$z|\mathbf{x}'\rangle = z'|\mathbf{x}'\rangle$$

Como $|\mathbf{x}'\rangle$ é suposto ser autoestado simultâneo de x, y, z, então

$$[x_i, x_j] = 0 \qquad i,j = x,y,z$$

<u>TRANSLAÇÃO</u> O operador de translação infinitesimal por $d\mathbf{x}'$ é definido por

$$\mathcal{T}(d\mathbf{x}')|\mathbf{x}'\rangle \equiv |\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'\rangle$$

seu efeito em um ket genérico pode ser calculado assim:

$$\mathcal{T}(d\vec{x})|\alpha\rangle = \mathcal{T}(d\vec{x})\int dx'\,|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\alpha\rangle = \int d\mathbf{x}'\,|\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle$$

$$= \int d\mathbf{x}'\,|\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'-d\mathbf{x}'|\alpha\rangle$$

<u>Propriedades</u>:

1) $\mathcal{T}(d\mathbf{x})$ é unitário, pois queremos manter a normalização de um estado transladado: $\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\alpha|\mathcal{T}^+\mathcal{T}|\alpha\rangle = 1 \Rightarrow \mathcal{T}^+\mathcal{T} = \mathbb{1}$

2) Duas translações consecutivas = 1 translação conjunta
$$\mathcal{T}(d\mathbf{x}')\,\mathcal{T}(d\mathbf{x}'') = \mathcal{T}(d\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'')$$

3) Translação inversa:
$$\mathcal{T}(d\mathbf{x}')^{-1} = \mathcal{T}(-d\mathbf{x}') \quad \text{ou} \quad \mathcal{T}(d\mathbf{x}')\,\mathcal{T}(-d\mathbf{x}') = \mathbb{1}$$

4) $\lim_{d\mathbf{x}'\to 0} \mathcal{T}(d\mathbf{x}') = 1$ ou $1 - \mathcal{T}(d\mathbf{x}') \propto d\mathbf{x}'$

Um operador com essas propriedades pode ser escrito como

$$\mathcal{T}(d\mathbf{x}') = 1 - i\mathbb{K}\cdot d\mathbf{x}'$$

onde K_x, K_y, K_3 são operadores hermitianos. A prova é imediata (lembre-se de descartar termos de ordem 2 em dx_i').

<u>Quem são os operadores $\mathbb{K}$?</u> Veja que

$$\mathbf{x}\,\mathcal{T}(d\mathbf{x}')\,|\mathbf{x}'\rangle = (\mathbf{x}'+d\mathbf{x}')\,|\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'\rangle$$ e

$$\mathcal{T}(d\mathbf{x}')\,\mathbf{x}\,|\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{x}'\,|\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'\rangle$$. Subtraindo obtemos

$$[\mathbf{x}, \mathcal{T}(d\mathbf{x}')]\,|\mathbf{x}'\rangle = d\mathbf{x}'\,|\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'\rangle = d\mathbf{x}'\,|\mathbf{x}'\rangle + \mathcal{O}(2).$$

$$\Downarrow$$

$$\mathbf{x}(1 - i\mathbb{K}\cdot d\mathbf{x}') - (1 - i\mathbb{K}\cdot d\mathbf{x}')\,\mathbf{x} = d\mathbf{x}'$$

$$-i\mathbf{x}(\mathbb{K}\cdot d\mathbf{x}') + i(\mathbb{K}\cdot d\mathbf{x}')\,\mathbf{x} = d\mathbf{x}'$$

Escolhendo $d\mathbf{x}' = dx_j$ e tomando a componente i dessa equação vetorial:

$$-i x_i K_j dx_j' + i K_j dx_j' x_i = dx_i' \delta_{ij}$$

$$-i[x_i K_j - K_j x_i]\,dx_j' = dx_i' \delta_{ij}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{[x_i, K_j] = i\delta_{ij}}$$

Na mecânica clássica os geradores de translações são os momentos. A transf. canônica

$$\mathbb{X} = \mathbf{x} + d\mathbf{x}$$

$$\mathbb{P} = \mathbf{p}$$

é gerado por $F(\mathbb{x}, \mathbb{P}) = \underbrace{\mathbb{x}\cdot\mathbb{P}}_{\substack{\uparrow \\ \text{identidade}}} + \mathbb{P}\cdot d\mathbb{x}$

$$\mathbb{p} = \frac{\partial F}{\partial \mathbb{x}} = \mathbb{P}$$

$$\mathbb{X} = \frac{\partial F}{\partial \mathbb{P}} = \mathbb{x} + d\mathbb{x}$$

Como a dimensão de $\mathbb{K}$ é $1/x$ vamos ajustando e defini-lo t.b. como operador momento em Mec. Quântica:

$$\mathbb{K} \equiv \mathbb{P}/\hbar$$

$$\mathcal{T}(d\mathbb{x}) = 1 - \frac{i\mathbb{P}\cdot d\mathbb{x}'}{\hbar}$$

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \longrightarrow \langle\Delta x^2\rangle\langle\Delta p^2\rangle \geqslant \hbar^2/4$$

Translações finitas são obtidas como o produto de várias infinitesimais:

$$\mathcal{T}(\Delta\mathbb{x}') = \lim_{N\to\infty}\left[\mathcal{T}\left(\frac{\Delta\mathbb{x}'}{N}\right)\right]^N = \lim_{N\to\infty}\left[1 - \frac{i\mathbb{P}\cdot\Delta\mathbb{x}'}{N\hbar}\right]^N = e^{-\frac{i\mathbb{P}\cdot\Delta\mathbb{x}'}{\hbar}}$$

O fato de que translações comutam implica que os p_i devem comutar. Por exemplo

$$\mathcal{T}(\Delta x\,\hat{x})\,\mathcal{T}(\Delta y\,\hat{y}) = \mathcal{T}(\Delta y\,\hat{y})\,\mathcal{T}(\Delta x\,\hat{x})$$

$$e^{-\frac{ip_x\Delta x}{\hbar}}\,e^{-\frac{ip_y\Delta y}{\hbar}} = e^{-ip_y\Delta y/\hbar}\,e^{-ip_x\Delta x/\hbar}.$$

Se $[p_i, p_j] = 0$ existem auto-estados simultâneos

$$|\mathbb{p}'\rangle = |p_x' p_y' p_z'\rangle.$$

Veja que $\mathcal{T}(d\mathbb{x}')|\mathbb{p}'\rangle = \left(1 - \frac{i\mathbb{p}'\cdot d\mathbb{x}'}{\hbar}\right)|\mathbb{p}'\rangle$ e

$$[\mathbb{P}, \mathcal{T}(d\mathbb{x}')] = 0$$

Finalmente notamos a relação entre os comutadores e os colchetes de Poisson. Dirac propôs que a quantização de variáveis em operadores deveria respeitar

$$[\ ,\ ]_{CLASS} \rightarrow \frac{[\ ,\ ]_{QUANT}}{i\hbar}$$

<u>Propriedades importantes dos comutadores</u>

$$[A,B] = -[B,A]$$
$$[A,BC] = B[A,C] + [A,B]C$$
$$[A,[B,C]] + [B,[C,A]] + [C,[A,B]] = 0$$

1.7 Funções de Onda em Posição e Momento

Temos que $x|x'\rangle = x'|x'\rangle$ com $\langle x'|x''\rangle = \delta(x'-x'')$ e

$$|\alpha\rangle = \int dx' \, |x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \equiv \int \psi_\alpha(x') \, |x'\rangle \, dx'$$

↑ função de onda para o estado $|\alpha\rangle$

As seguintes relações podem ser verificadas:

- $\langle\beta|\alpha\rangle = \int dx' \langle\beta|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \int \psi_\beta^*(x')\,\psi_\alpha(x')\,dx'$

- se $|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \underbrace{\langle a'|\alpha\rangle}_{c_{a'}}$ → $\psi(x) = \sum_{a'} c_{a'}\, u_{a'}(x)$

  ↑ Autofunções do operador A

  com $A|a'\rangle = a'|a'\rangle$

- $\langle\beta|A|\alpha\rangle = \int \langle\beta|x'\rangle\langle x'|A|x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle \, dx' dx''$

Se $A = f(x)$ então $\langle x' | A | x'' \rangle = f(x')\,\delta(x' - x'')$

e $\langle \beta | f(x) | \alpha \rangle = \int \psi_\beta^*(x')\, f(x')\, \psi_\alpha(x')\, dx'$

Ação do operador p em funções de onda de posição

$$T(\Delta x')|\alpha\rangle = \int T(\Delta x')|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle\, dx' = \int |x'+\Delta x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle\, dx'$$

$$= \int |x'\rangle\langle x'-\Delta x'|\alpha\rangle\, dx'$$

$$= \left(1 - \frac{i}{\hbar} p \Delta x'\right)|\alpha\rangle = \int |x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle dx' - \frac{i}{\hbar}\Delta x'\, p|\alpha\rangle$$

$$\int |x'\rangle \Bigg[\underbrace{\frac{\langle x'-\Delta x'|\alpha\rangle - \langle x'|\alpha\rangle}{\Delta x'}}_{-\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle} \Bigg] dx' = -\frac{i}{\hbar} p|\alpha\rangle \Rightarrow$$

$$p|\alpha\rangle = \int |x'\rangle\, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\left(\langle x'|\alpha\rangle\right) dx'$$ ou ainda

$$\boxed{\langle x'|p|\alpha\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\left(\langle x'|\alpha\rangle\right)}$$. Daí segue que:

- $$\langle\beta|p|\alpha\rangle = \int \langle\beta|x'\rangle\langle x'|p|\alpha\rangle\, dx' = \int \psi_\beta^*(x')\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\psi_\alpha(x')\right] dx'$$

- $$\langle x'|p^2|\alpha\rangle = \int \langle x'|p|x''\rangle\langle x''|p|\alpha\rangle\, dx'' = \int -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\left(\delta(x'-x'')\right) -i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\psi_\alpha(x'')$$

$$= \int \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x'-x'')\right]\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\psi_\alpha(x'')\right] dx'' = \int \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\right)^2 \psi_\alpha(x'')\,\delta(x'-x'')\,dx''$$

$$= \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)^2 \psi_\alpha(x')$$

$$- \langle x' | p^n | \alpha \rangle = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\right)^n \psi_\alpha(x')$$

$$- \langle x' | g(p) | \alpha \rangle = g\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\right) \psi_\alpha(x')$$

$$- \langle p | p^n | \alpha \rangle = \int \psi_p^*(x') \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\right)^n \psi_\alpha(x')\, dx'$$

— *

Funções de onda em momentos

$$|\alpha\rangle = \int |p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle\, dp' \equiv \int \phi_\alpha(p')\, |p'\rangle\, dp'$$

$$\langle x'|p|p'\rangle = p' \langle x'|p'\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|p'\rangle$$

$$\Rightarrow \langle x'|p'\rangle = N e^{ip'x'/\hbar}$$

normalização:

$$\langle x'|x''\rangle = \int \langle x'|p'\rangle\langle p'|x''\rangle\, dp'$$

$$\delta(x'-x'') = |N|^2 \underbrace{\int e^{\frac{ip'}{\hbar}(x'-x'')}\, dp'}_{2\pi\hbar\, \delta(x'-x'')}$$

$$\boxed{\langle x'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'x'/\hbar}}$$

$$\langle x'|\alpha\rangle = \int \langle x'|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle\, dp' \longrightarrow \psi_\alpha(x') = \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'x'/\hbar} \phi_\alpha(p')\, dp'$$

$$\langle p'|\alpha\rangle = \int \langle p'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle\, dx' \longrightarrow \phi_\alpha(p') = \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ip'x'/\hbar} \psi_\alpha(x')\, dx'$$

---

* A equação de autovalores $H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$ p/ $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ fica

$\langle x|H|\varphi\rangle = E\langle x|\varphi\rangle$ ou $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x)$.

PACOTES GAUSSIANOS

Um estado de particular interesse em várias aplicações são os estados GAUSSIANOS definidos por

$$\langle x'|\alpha\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4} d^{1/2}} \exp\left\{ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}\right\}$$

que possui as seguintes propriedades:

$$\langle x\rangle = \langle\alpha|x|\alpha\rangle = \int x' |\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx' = 0$$

$$\langle p\rangle = \langle\alpha|p|\alpha\rangle = \int \langle\alpha|x'\rangle\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\left(\langle x'|\alpha\rangle\right)\right] dx'$$

$$= \frac{1}{\pi^{1/2} d}\int \left(\hbar k + \frac{i\hbar x'}{d^2}\right) e^{-x'^2/d^2} dx' = \hbar k$$

$$\langle x^2\rangle = \int x'^2 |\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx' = \frac{1}{\pi^{1/2} d}\int x'^2 e^{-x'^2/d^2} dx' = \frac{d^2}{\sqrt{\pi}}\underbrace{\int x'^2 e^{-x'^2} dx'}_{\sqrt{\pi}/2}$$

$$= d^2/2$$

$$\langle p^2\rangle = \int \langle\alpha|x'\rangle\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)^2 \langle x'|\alpha\rangle\, dx' = \int \langle\alpha|x'\rangle\left[\left(\hbar k + \frac{i\hbar x'}{d^2}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{d^2}\right]\langle x'|\alpha\rangle\, dx'$$

$$= \hbar^2 k^2 + \frac{\hbar^2}{d^2} - \frac{\hbar^2}{d^2}\underbrace{\int x'^2 |\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx'}_{d^2/2} = \hbar^2 k^2 + \frac{\hbar^2}{2d^2}$$

$$\langle \Delta x^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = d^2/2$$

$$\langle \Delta p^2\rangle = \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2 = \hbar^2 k^2 + \hbar^2/2d^2 - \hbar^2 k^2 = \hbar^2/2d^2$$

$$\langle \Delta x^2\rangle\langle \Delta p^2\rangle = \hbar^2/4 \implies \text{estados de incerteza mínima}$$

Na representação de momentos temos

$$\langle p'|\alpha\rangle = \int \frac{e^{-ip'x'/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\pi^{1/4} d^{1/2}} e^{ikx' - x'^2/2d^2} dx'$$

escrevendo o expoente como $-\frac{x'^2}{2d^2} + ix'(k - p'/\hbar)$

$$= -\frac{1}{2d^2}\left[x' - id^2(k-p'/\hbar)\right]^2 - \frac{d^2}{2}(k-p'/\hbar)^2$$

e chamando $u = x' - id^2(k-p'/\hbar)$

$$\langle p'|\alpha\rangle = \int \frac{du}{\pi^{1/4} d^{1/2}} \frac{e^{-u^2/2d^2 - \frac{d^2}{2}(k-p'/\hbar)^2}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \frac{\sqrt{2\pi d^2}}{\sqrt{2\pi\hbar}\, \pi^{1/4} d^{1/2}} e^{-\frac{d^2}{2\hbar^2}(\hbar k - p')^2}$$

$$= \frac{d^{1/2}}{\hbar^{1/2}\pi^{1/4}} e^{-\frac{d^2}{2\hbar^2}(\hbar k - p')^2}$$

Generalização 3-D

$$|\alpha\rangle = \int |\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle\, d^3x'$$

$$|\alpha\rangle = \int |\mathbf{p}'\rangle\langle\mathbf{p}'|\alpha\rangle\, d^3p'$$

$$\langle\beta|\mathbf{p}|\alpha\rangle = \int d^3x'\, \psi_\beta^*(\mathbf{x}') \left(-i\hbar\nabla\psi_\alpha(\mathbf{x}')\right)$$

$$\langle\mathbf{x}|\mathbf{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}$$