Dinâmica quântica.

Refs.: Cap. 8, Messiah
Caps. 9, 10, 14 e 15, Merzbacher.

Lembrar mecânica clássica: estado do sistema em um certo instante de tempo t pode ser completamente determinado: em princípio, as variáveis dinâmicas (e.g., $\vec{r} = \vec{r}(t)$, $\vec{p} = \vec{p}(t)$) que descrevem o sistema podem ser simultaneamente determinadas;

mecânica quântica: $\exists$ limitações na determinação simultânea das variáveis dinâmicas associadas a um dado sistema; nesse caso

(i) é possível apenas determinar a distribuição estatística dos possíveis valores das variáveis dinâmicas e

(ii) máxima info sobre o sistema ~ conjunto completo de variáveis (dinâmicas) compatíveis (conj. completo de observáveis que comutam)

ideia: estabelecer os postulados (princípios fundamentais) da teoria $\rightarrow$ determinação variáveis dinâmicas (estado dinâmico) do sistema.

Lembrar: comportamento ondulatório sistemas microscópicos
↳ estados do sistema podem ser linearmente combinados (53.1)

↳ postulado (1): estado do sistema é descrito por um vetor $|\psi(t)\rangle \in$ espaço vetorial $\mathcal{E}$;

hipótese: $\mathcal{E}$ possui a estrutura de um espaço de Hilbert além disso, temos que

postulado (2) : p/ cada uma das variáveis dinâmicas corresponde um observável associado ao espaço vetorial $\mathcal{E}$.

· Definição das distribuições de probabilidades.

dado estado $|\psi(t)\rangle$ -> distribuição estatística possíveis valores associados a cada variável dinâmica;
a determinação dessa distribuição é baseada no

postulado (3) : se $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{E}$ corresponde ao estado do sistema e A é um observável -> p/ $\forall$ função F(A) :

$$\langle F(A)\rangle = \langle\psi(t)|F(A)|\psi(t)\rangle \ : \text{ valor médio } F(A) \qquad (54.1)$$

Lembrar : distribuição de probabilidades P(x) é completamente determinada através da função característica $\phi(t)$ definida por :

$$f(\xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, P(x)\, e^{i\xi x} \qquad (54.2)$$

em particular, p/ estado $|\psi(t)\rangle$ e observável A :

$$f(\xi) = \langle e^{i\xi A}\rangle = \langle\psi(t)|\, e^{i\xi A}\, |\psi(t)\rangle \qquad (54.3)$$

notar : - se $|\phi\rangle = e^{i\alpha}|\psi\rangle$; $\alpha \in \mathbb{R}$ -> $\langle\phi|e^{i\xi A}|\phi\rangle = \langle\psi|e^{i\xi A}|\psi\rangle = f(\xi)$
↳ distrib. probabilidades ~ vetores $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$ são iguais;

· como $f(\xi=0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, P(x) = 1$ -> $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1$ (54.4) considerar observável A, espectro não degenerado:

$$A|n\rangle = a_n|n\rangle \quad ; \quad n=1,2,\ldots$$

↳ $|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle \quad ; \quad c_n \in \mathbb{C}$ e:

$$f(\xi) = \langle\psi|e^{i\xi A}|\psi\rangle = \sum_{mn} c_m^* c_n \langle m|e^{i\xi A}|n\rangle = \sum_{mn} c_m^* c_n e^{i\xi a_n}\langle m|n\rangle$$

$$= \sum_n |c_n|^2 e^{i\xi a_n} \quad : \text{versão discreta Eq. (54.2)} \qquad (55.1)$$

↳ a_n (autovalores A): possíveis valores variável dinâmica ~ A

$w_n \equiv |c_n|^2$: probabilidade medida $A \longrightarrow a_n$ (55.2)

· a condição de normalização (54.4) pode ser relaxada se

$$\text{Eq. (54.1)} \rightarrow \langle F(A)\rangle = \frac{\langle\psi(t)|F(A)|\psi(t)\rangle}{\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle} \qquad (55.3)$$

novamente: considerar observável A, espectro discreto:

$$A|n,i\rangle = a_n|n,i\rangle \quad ; \quad n=1,2,\ldots \quad ; \quad i=1,2,\ldots,g_n$$

↳ $|\psi\rangle = \sum_{n,i} c_{n,i}|n,i\rangle$ e:

$$\langle e^{i\xi A}\rangle = \sum_{nm}\sum_{ij} c_{m,j}^* c_{n,i}\langle m,j|e^{i\xi A}|n,i\rangle$$

$$= \sum_{nm}\sum_{ij} c_{m,j}^* c_{n,i} e^{i\xi a_n}\langle m,j|n,i\rangle = \sum_{n,i}|c_{n,i}|^2 e^{i\xi a_n}$$

(55.4)

↳ $$f(\xi) = \sum_{n,i}\frac{|c_{n,i}|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} e^{i\xi a_n} = \sum_n w_n e^{i\xi a_n}$$

notar: $\sum_{i=1}^{g_n} |c_{n,i}|^2 = \sum_i |\langle n,i|\psi\rangle|^2 = \sum_i \langle\psi|n,i\rangle\langle n,i|\psi\rangle$

$= \langle\psi| \underbrace{\left(\sum_i |n,i\rangle\langle n,i|\right)} |\psi\rangle = \langle\psi|P_n|\psi\rangle = \langle\psi|P_n^2|\psi\rangle$

P_n : projetor subespaço $\mathcal{E}_n$ do autovalor a_n

↳ $w_n = P(a_n) = \dfrac{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$ (56.1)

similar, observável A, espectro contínuo,

$A|\nu\rangle = a(\nu)|\nu\rangle$; $-\infty < \nu < +\infty$: índice contínuo

↳ $|\psi\rangle = \int d\nu\, \psi(\nu)|\nu\rangle$ e

$\langle e^{i\xi A}\rangle = \int d\nu' d\nu\, \psi^*(\nu')\psi(\nu) \underbrace{\langle\nu'|e^{i\xi A}|\nu\rangle}_{\underbrace{\langle\nu'|\nu\rangle}_{\delta(\nu'-\nu)} e^{i\xi a(\nu)}} = \int d\nu\, |\psi(\nu)|^2 e^{i\xi a(\nu)}$

(56.2)

↳ $w(\nu) = dP(a(\nu)) = \dfrac{|\psi(\nu)|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} d\nu$: probabilidade medida observável A obter valor $\in [a(\nu); a(\nu+d\nu)]$

notar Eq. (56.1) :

- $\sum_n w_n = \dfrac{1}{\langle\psi|\psi\rangle} \sum_n \langle\psi|P_n|\psi\rangle = \dfrac{1}{\langle\psi|\psi\rangle} \langle\psi| \underbrace{\sum_n P_n}_{=1} |\psi\rangle = 1$

- $\langle\psi|A|\psi\rangle = \sum_{n,m}\sum_{i,j} c^*_{m,j} c_{n,i} \underbrace{\langle m,j|A|n,i\rangle}_{a_n\langle m,j|n,i\rangle} = \sum_{n,i} |c_{n,i}|^2 a_n$

↳ $\langle A\rangle = \dfrac{\langle\psi|A|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \sum_n w_n a_n = \sum_n P(a_n) a_n$ (56.3)

Eq. (56.3) : similar p/ observável A espectro contínuo

Eqs. (54.3) - (56.3) -> postulado (3) pode ser reescrito como:

postulado (3):

(i) os únicos valores possíveis que uma variável dinâmica pode assumir são os <u>autovalores</u> do observável A associado a essa variável;

(ii) a probabilidade $w_n = P(a_n)$ de obtermos o valor a_n quando o observável A é medido em um sistema no estado $|\psi(t)\rangle$ é

$$w_n = P(a_n) = \langle\psi(t)|P_n|\psi(t)\rangle / \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle \qquad (57.1)$$

onde P_n: projetor subespaço E_n associado ao autovalor a_n; similar p/ observável A c/ espectro contínuo, veja Eq. (56.2)

Eqs. (54.3) - (56.3): informações sobre o sistema <u>antes</u> do processo de medida do observável A;

próxima etapa: determinação estado do sistema <u>após</u> o processo de medida do observável A

hipótese: processo de medida é <u>ideal</u>:
- perturbações relacionados ao medidor ~ aspectos quânticos da medida (Cohen) ou
- o sistema físico não é destruído após o processo de medida (Le Bellac)

Ex.: experimento de Stern-Gerlach (detalhes à posteriori)

nesse caso, experimento ~ filtro de spin;
possíveis estados sistema (spin ↑ e spin ↓) são ascessíveis antes e após o processo de medida

considerar: estado do sistema descrito vetor $|\psi\rangle$ e um observável A c/ espectro discreto:

$$A|n,i\rangle = a_n|n,i\rangle\ ,\quad n=1,2,\dots,\quad i=1,2,\dots,g_n\ ;$$

o estado do sistema após a medida (ideal) do observável A é dado pelo

postulado (4):

$$\underset{\substack{\text{estado sistema}\\ \underline{\text{antes}}\text{ medida}}}{|\psi\rangle} \xrightarrow[\text{OBSERVÁVEL } A\, =\, a_n]{\text{MEDIDA IDEAL}} \underset{\substack{\text{estado sistema}\\ \underline{\text{após}}\text{ a medida}}}{\frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}} \qquad (58.1)$$

lembrar: $\langle\psi|P_n^2|\psi\rangle = \langle\psi|P_n|\psi\rangle$

Eq. (58.1): redução do pacote de onda (filtering of the wave packet)

similar observável A c/ espectro contínuo $A|\nu\rangle = a(\nu)|\nu\rangle$:

$$|\psi\rangle \xrightarrow[A\,\in\,[a(\nu)\,;\,a(\nu+d\nu)]]{\text{MEDIDA IDEAL OBSERVÁVEL}} \frac{\Delta P_\nu|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\Delta P_\nu|\psi\rangle}} \qquad (58.2)$$

onde $\Delta P_\nu = \displaystyle\int_\nu^{\nu+d\nu} d\nu'\, |\nu'\rangle\langle\nu'|$

Obs.: lembrar que a determinação experimental da distribuição de probabilidades $w_n = P(a_n)$ pode ser feita considerando-se $\mathcal{N} \gg 1$ sistemas idênticos,

independentes e preparados no estado $|\psi\rangle$
1 medida observável A $\rightarrow$ determinação $P(a_n)$!
(p/ detalhes, veja Sec. V.13, Messiah)

· Até o momento: postulados (1)-(4) $\rightarrow$ determinação distribuição de probabilidades ~ observável A dado que o sistema descrito por $|\psi\rangle$;

· próxima etapa: determinação do espaço de Hilbert apropriado p/ descrever o sistema;

inicial: escolha das variáveis dinâmicas apropriadas p/ descrever o sistema -> escolha dos observáveis correspondentes e determinação da álgebra dos observáveis (relações de comutação).

hipótese: sistema quântico possui um análogo clássico; nesse caso, podemos utilizar o princípio de correspondência p/ escolha dos observáveis

Lembrar princípio de correspondência:

$$\langle \text{observável } A \rangle \xrightarrow[\hbar \to 0]{} \text{valor clássico correspondente} \qquad (59.1)$$

descrição sistema clássico através 2N variáveis independentes (formulação hamiltoniana):

$$\begin{array}{ll} q_1, q_2, \ldots, q_N : & \text{coordenadas espaciais} \\ p_1, p_2, \ldots, p_N : & \text{momentos canonicamente conjugados} \end{array} \qquad (59.2)$$

em princípio, $\forall$ variável dinâmica F: $F(q_i, p_j)$

↳ p/ descrição sistema quântico : introdução 2N observáveis correspondentes a (59.2) :

$q_1, q_2, \ldots, q_N$ e $p_1, p_2, \ldots, p_N$ tais que :

$$[q_i, q_j] = [p_i, p_j] = 0 \quad \text{e} \quad [q_i, p_j] = i\hbar \qquad (60.1)$$

notar : dado observáveis $A = A(q,p)$ e $B = B(p,q)$, onde

$q : q_1, q_2, \ldots, q_N$ e $p : p_1, p_2, \ldots, p_N$

↳ relações de comutação fundamentais (60.1)

↳ determinação $[A, B]$.

além (60.1) é necessário :

- introduzir observável H que corresponde à função hamiltoniana $\mathcal{H}$ do sistema clássico correspondente, i.e. :

$H = \mathcal{H}$ ⊕ coordenadas e momentos → operadores (variáveis clássicas) (60.2)

Obs. : 2 regras empíricas <u>importantes</u> :

(i) a correspondência (59.2) - (60.1) deve ser estabelecida, em princípio, p/ <u>coordenadas cartesianas</u> (veja discussão abaixo) ;

(60.3)

(ii) produtos do tipo $q_i p_i$ (par canonicamente conjugado) devem ser <u>simetrizados</u> antes passagem p/ operadores ;

Ex. : $x p_x = \frac{1}{2}(x p_x + p_x x)$ → operador correspondente ;

veja Exercício 14.5, Merzbacher.

sobre a regra de quantização (60.1),
dado um par de variáveis (clássicas) canonicamente conjugadas
q e p distintas coordenadas cartesianas, verifica-se que
é possível utilizar (60.1) se

x, p_x ——— conjunto transformações $\rightarrow q, p$ (61.1)
possível escolha ↑ canônicas infinitesimais

se (60.1) ok → variáveis clássicas p e q → operadores p e q tais que $[q, p] = i\hbar$

contra exemplo: coordenadas esféricas r, θ, φ : Eq. (61.1) not ok!
(p/ detalhes, veja Sec. 14.4, Merzbacher)

· Relações de incerteza de Heisenberg.
considerar 2 observáveis A e B;
vimos que
se $[A, B] = 0$ → A e B podem ser medidos simultaneamente
se $[A, B] \neq 0$ → " NÃO " " " "
↳ $[A, B]$ ~ imprecisão na medida simultânea de A e B !

De fato, verifica-se que se $[A, B] = iC$, onde C é
um operador hermitiano

$$\hookrightarrow \Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle C \rangle| , \qquad (61.2)$$

onde $\Delta A = \left(\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right)^{1/2}$: variância ou incerteza A

Eq. (61.2) : relação de incerteza !

vamos verificar (61.2):

considerar operadores $\hat{A} = A - \langle A \rangle$ e $\hat{B} = B - \langle B \rangle$

$\hookrightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = [A, B] = iC$

notar: $\hat{A}^2 = A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rightarrow \langle \hat{A}^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = (\Delta A)^2$

como $\langle \hat{A} \rangle = 0 \rightarrow \Delta \hat{A} = \langle \hat{A}^2 \rangle^{1/2} = \Delta A$ (62.1)

similar: $\Delta \hat{B} = \langle \hat{B}^2 \rangle^{1/2} = \Delta B$

Lembrar desigualdade de Schwarz (14.1):

$|\langle a|b \rangle|^2 \leq \langle a|a \rangle \langle b|b \rangle$

se $|a\rangle = \hat{A}|u\rangle$ e $|b\rangle = \hat{B}|u\rangle$

$\hookrightarrow |\langle u|\hat{A}\hat{B}|u\rangle|^2 \leq \langle u|\hat{A}^2|u\rangle\langle u|\hat{B}^2|u\rangle \overset{\text{Eq. (62.1)}}{=} (\Delta A)^2(\Delta B)^2$

notar: $\hat{A}\hat{B} = \frac{1}{2}\hat{A}\hat{B} + \frac{1}{2}\hat{A}\hat{B} + \frac{1}{2}\hat{B}\hat{A} - \frac{1}{2}\hat{B}\hat{A}$

$= \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}) + \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \equiv F + \frac{1}{2}iC$

como $\langle F \rangle \in \mathbb{R}$ pois F é operador hermitiano

$\hookrightarrow (\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq |\langle \hat{A}\hat{B} \rangle|^2 = \langle F \rangle^2 + 1/4\langle C \rangle^2 \geq 1/4\langle C \rangle^2$: Eq. (61.2)

em particular, p/ igualdade em (61.2) (menor valor relação de incerteza) é necessário:

(i) $\hat{A}|u\rangle = \lambda\hat{B}|u\rangle$, $\lambda \in \mathbb{C}$: condição ~ desigualdade de Schwarz e (62.2)

(ii) $\langle F \rangle = 0$

↳ $\langle u | \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} | u \rangle \overset{\text{Eq. (62.2)}}{=} (\lambda^* + \lambda) \langle u | \hat{B}^2 | u \rangle = 0 \rightarrow \lambda$: imaginário puro

se $\lambda = i r$; $r \in \mathbb{R}$

↳ $\hat{A}|u\rangle = \lambda \hat{B}|u\rangle \rightarrow (A - \langle A \rangle)|u\rangle = i r (B - \langle B \rangle)|u\rangle$ (63.1)

Ex.: $A = x$ e $B = p_x$: $[x, p_x] = i\hbar$

e $\Delta x \, \Delta p_x \geq \frac{1}{2}\hbar$ (63.2)

: novamente,

- 1ª etapa determinação espaço de Hilbert: escolha dos observáveis necessários p/ descrever o sistema e determinação da álgebra (relações de comutação) desses observáveis;

↳ próxima etapa: determinação base p/ o espaço de Hilbert.

ideia: dentre os possíveis observáveis, escolher um conjunto completo de observáveis que comutam

↳ escolha da base p/ o espaço vetorial!

e.g., considerar A, B e C : conjunto completo de observáveis que comutam (CCOC)

$[A, B] = [A, C] = [B, C] = 0$ e

$A|abc\rangle = a|abc\rangle$; $B|abc\rangle = b|abc\rangle$; $C|abc\rangle = c|abc\rangle$

↳ vetores $|abc\rangle$: base p/ espaço de Hilbert

em particular, se $\langle abc | a'b'c' \rangle = \delta_{a,a'} \delta_{b,b'} \delta_{c,c'}$: base ortonormal.

notar: como A, B e C é um CCOC → conjunto de autovalores a, b, c ~ único estado $|abc\rangle$

Lembrar pg. 53: medida simultânea das variáveis dinâmicas relacionadas aos observáveis A, B e C: máxima info sobre o sistema.

notar: álgebra observáveis → escolha CCOC → escolha base p/ espaço vetorial = " " Hilbert!

Ex.: partícula em 1-D,

considerar: partícula massa m, movimento em 1-D:

nesse caso: ∃ sistema clássico análogo!

Obs.: discussão similar Sec. VIII.6, Messiah, porém notação $q \to x$!

forma geral dos observáveis: $A = A(x,p)$, onde

x: operador posição e

p: " momento tal que $[x,p] = i\hbar$: álgebra observáveis

de fato, op. posição x: conjunto completo de observáveis que comutam

Lembrar que: se observável $A = A(x,p) \to [x, A(x,p)] = i\hbar \dfrac{\partial A}{\partial p}$

↳ determinação álgebra demais observáveis!

· sobre o espectro op. posição x,

vamos verificar que op. posição apresenta um espectro contínuo:

$$x|x'\rangle = x'|x'\rangle \quad ; \quad -\infty < x' < +\infty \qquad (64.1)$$

em princípio, como medida posição partícula está entre $-\infty$ e $+\infty$ → autovalores x' : $-\infty < x' < +\infty$

alternativa: como $[x,p] = i\hbar$

$$\hookrightarrow \langle x'|xp|x'\rangle - \langle x'|px|x'\rangle = i\hbar\langle x'|x'\rangle \qquad (65.1)$$

se $\langle x'|x'\rangle = N < +\infty \xrightarrow{\text{Eqs. (64.1) e (65.1)}} 0 = N$: contradição

$\hookrightarrow$ $|x'\rangle$: norma infinita ou $\langle x'|x''\rangle = \delta(x'-x'')$: indicação espectro contínuo!

considerar operador:

$$U(\xi) = e^{-ip\xi/\hbar}, \quad \xi \in \mathbb{R} \qquad (65.2)$$

notar: $\cdot\ U^\dagger(\xi) = e^{ip\xi/\hbar} = U(-\xi)$

$$U^\dagger(\xi)U(\xi) = U(\xi)U^\dagger(\xi) = 1 \quad : U(\xi) \text{ op. unitário}$$

$$[x, U(\xi)] = [x, e^{-ip\xi/\hbar}] = i\hbar\frac{dU}{dp} = \xi U(\xi)$$

$\hookrightarrow$ $xU(\xi) - U(\xi)x = \xi U(\xi)$ → $xU(\xi)|x'\rangle - U(\xi)x|x'\rangle = \xi U(\xi)|x'\rangle$

$xU(\xi)|x'\rangle - x'U(\xi)|x'\rangle = \xi U(\xi)|x'\rangle$

$\hookrightarrow$ $x\big(U(\xi)|x'\rangle\big) = (x'+\xi)\big(U(\xi)|x'\rangle\big)$: $U(\xi)|x'\rangle$: autovetor op. x c/ autovalor $x'+\xi$ (65.3)

Eq. (65.3) → $U(\xi)|x'\rangle \propto |x'+\xi\rangle$ ou

$$U(\xi)|x'\rangle = c(x',\xi)|x'+\xi\rangle \ ; \quad c(x',\xi) \in \mathbb{C}$$

 como:

(i) $\langle x''|U^{\dagger}(\xi)U(\xi)|x'\rangle = C^{*}(x'',\xi)\,C(x',\xi)\,\langle x''+\xi|x'+\xi\rangle = \langle x''|x'\rangle$

pois $U(\xi)$ op. unitário

↳ $C^{*}(x'',\xi)\,C(x',\xi)\,\delta(x''-x') = \delta(x''-x') \rightarrow |C(x',\xi)|^2 = 1$

(ii) considerando que $U(x')|0\rangle = |x'\rangle \rightarrow C(x',\xi) = 1$

↳ $U(\xi)|x'\rangle = |x'+\xi\rangle$ (66.1)

como $\xi \in \mathbb{R} \xrightarrow{\text{Eq. (66.1)}} -\infty < x' < +\infty$

dessa forma, p/ operador posição x, temos que:

$x|x'\rangle = x'|x'\rangle \quad , \; -\infty < x' < +\infty$

$\langle x'|x''\rangle = \delta(x'-x'')$: condição de ortonormalidade

(66.2)

$\int_{-\infty}^{+\infty} dx'\,|x'\rangle\langle x'| = 1$: relação de completeza

↳ vetores $|x'\rangle$: base p/ espaço de Hilbert !

Eq. (66.2) : equações fundamentais da representação de coordenadas.
(veja Eq. (40.1))

· sobre a representação de coordenadas (veja Sec. 9.6, Merzbacher)
considerar vetor arbitrário $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$; temos que

$|\psi\rangle = 1\cdot|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\,\langle x'|\psi\rangle\,|x'\rangle$: representação de coordenadas vetor $|\psi\rangle$ (66.3)

identificando : $\psi(x') = \langle x'|\psi\rangle$: conexão entre estado $|\psi\rangle$ e a função de onda $\psi(x')$:

primeira etapa : formalismo abstrato M.Q. $\longrightarrow$ mecânica ondulatória !

· produto escalar,

$$\langle \psi_a | \psi_b \rangle = \langle \psi_a | 1 | \psi_b \rangle = \int dx' \langle \psi_a | x' \rangle \langle x' | \psi_b \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \, \psi_a^*(x') \, \psi_b(x') \qquad (67.1)$$

· operador A : $\langle x'' | A | x' \rangle$: elemento da matriz que representa op. A na representação de coordenadas;

em particular, verifica-se que o op. posição é diagonal nessa representação :

$$\langle x'' | x | x' \rangle = x' \langle x'' | x' \rangle = x' \delta(x'' - x') \qquad (67.2)$$

se op. $A = A(x)$ $\xrightarrow{\text{Eq. (35.1)}}$ $\langle x'' | A | x' \rangle = A(x') \, \delta(x'' - x')$

· considerar op. momento p,

vamos determinar $\langle x'' | p | x' \rangle$: como $[x, p] = i\hbar$

↳ $\langle x'' | xp - px | x' \rangle = (x'' - x') \langle x'' | p | x' \rangle = i\hbar \langle x'' | x' \rangle$

↳ $$\langle x'' | p | x' \rangle = \frac{i\hbar}{x'' - x'} \delta(x'' - x') = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x''} \delta(x'' - x') \qquad (67.3)$$

identidade : $x \, \delta'(x) = -\delta(x)$

se $F = F(p)$: op. que pode ser escrito como uma série de potências em p, verifica-se que (veja Exercise 9.21, Merzbacher)

$$\langle x'' | F(p) | x' \rangle = F(-i\hbar \partial_{x''}) \, \delta(x'' - x') \qquad (67.4)$$

↳ p/ $\forall \; |\psi\rangle \in \mathcal{E}$, temos que

$$F(p)|\psi\rangle = 1 \cdot F(p) \cdot 1 |\psi\rangle = \int dx' dx'' \, |x''\rangle\langle x''| F(p) |x'\rangle\langle x'|\psi\rangle$$

$$= \int dx' dx'' \, |x''\rangle \, F\left(-i\hbar\partial_{x''}\right) \delta(x''-x') \, \psi(x')$$

$$= \int dx'' \, |x''\rangle \, F(-i\hbar\partial_{x''}) \, \psi(x'') \qquad (68.1)$$

$$\hookrightarrow \langle\psi_2|F(p)|\psi_1\rangle = \int dx' \, \psi_2^*(x') \, F(-i\hbar\partial_{x'}) \, \psi_1(x') \qquad (68.2)$$

Eqs. (67.3) - (68.2) permite identificar: $p \to -i\hbar\partial_x$: op. momento na rep. coordenadas ~ mecânica ondulatória

· sobre o espectro do op. momento p.

se $p|p'\rangle = p'|p'\rangle$, temos que na rep. de coordenadas:

$$\langle x'|p|p'\rangle = \int dx'' \langle x'|p|x''\rangle\langle x''|p'\rangle = \int dx'' \, (-i\hbar\partial_{x'}) \, \delta(x'-x'') \langle x''|p'\rangle$$

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

definindo : $\psi_{p'}(x') \equiv \langle x'|p'\rangle$

$\hookrightarrow -i\hbar\partial_{x'}\psi_{p'}(x') = p'\psi_{p'}(x')$

$\hookrightarrow$ solução eq. diferencial : $\psi_{p'}(x') = \langle x'|p'\rangle = \underbrace{\mathcal{N}}_{\text{cte}} e^{ip'x'/\hbar}$ (68.3)

Eq. (68.3) : $\nexists$ restrição sobre valores $p' \to -\infty < p' < +\infty$, i.e. op. momento p apresenta um espectro contínuo.

dessa forma, p/ op. momento p, temos que :

$$p|p'\rangle = p'|p'\rangle \quad , \quad -\infty < p' < +\infty \qquad (68.4)$$

$\langle p' | p'' \rangle = \delta(p' - p'')$: condição de ortonormalidade

$$\int dp' \, |p'\rangle\langle p'| = 1 \quad : \text{relação de completeza} \qquad (69.1)$$

↳ vetores $|p'\rangle$: base p/ espaço de Hilbert

Eqs. (68.4) e (69.1) : equações fundamentais da representação de momento

sobre a cte N: temos que

$$\langle x' | x'' \rangle = \delta(x' - x'') = \int dp' \langle x' | p' \rangle \langle p' | x'' \rangle = |N|^2 \int dp' \, e^{ip'.(x'-x'')/\hbar}$$

$$= 2\pi\hbar \, |N|^2 \, \delta(x' - x'') \rightarrow N = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \in \mathbb{R} \,! \qquad (69.2)$$

Eq. (68.3) : $\psi_{p'}(x') = \langle x' | p' \rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'x'/\hbar}$: onda plana : (69.3)

: função de onda p/ partícula livre em 1-D !

notar : $p' \in \mathbb{R}$ ~ consistência Eqs. (69.1) e (69.2)

· p/ vetor arbitrário $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$, temos que

$$|\psi\rangle = 1 . |\psi\rangle = \int dp' \langle p' | \psi \rangle |p'\rangle \quad : \text{representação de momento vetor } |\psi\rangle \qquad (69.4)$$

similar $\psi(x') = \langle x' | \psi \rangle$, define-se $\bar{\psi}(p') = \langle p' | \psi \rangle$.

· Eq. (68.3) : permite determinar a relação entre
$\psi(x')$: componentes vetor $|\psi\rangle$ na rep. coordenadas e
$\bar{\psi}(p')$: " " " " " momento

$$\psi(x') = \langle x'|\psi\rangle = \int dp' \langle x'|p'\rangle\langle p'|\psi\rangle = \int \frac{dp'}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{ip'x'/\hbar}\, \bar{\psi}(p')$$

e

$$\bar{\psi}(p') = \langle p'|\psi\rangle = \int dx' \langle p'|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle = \int \frac{dx'}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{-ip'x'/\hbar}\, \psi(x') \qquad (70.1)$$

: transformada de Fourier

Eq. (68.3) : $\langle x'|p'\rangle$: elemento matriz de transformação $\leftrightarrows$ base $|p'\rangle$ p/ base $|x'\rangle$!

· sobre op. unitário $U(\xi)$, Eq. (65.2), notar:

(i) $U(\xi)\, x\, U^{\dagger}(\xi) = e^{-ip\xi/\hbar}\, x\, e^{+ip\xi/\hbar}$:

$$= x + \left(\frac{-i\xi}{\hbar}\right)\underbrace{[p,x]}_{-i\hbar} + \frac{1}{2!}\left(\frac{-i\xi}{\hbar}\right)^2 \underbrace{[p,[p,x]]}_{=0} + \dots$$

Eq. (16.4)

$= x - \xi$

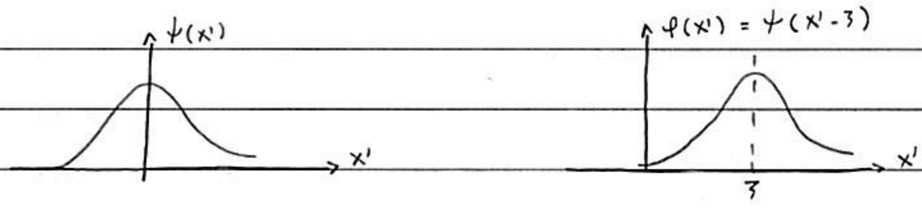
↳ $U(\xi)\, x\, U^{\dagger}(\xi) = x - \xi \qquad (70.2)$

(ii) se $|\varphi\rangle = U(\xi)|\psi\rangle$

↳ $\varphi(x') = \langle x'|\varphi\rangle = \langle x'|U(\xi)|\psi\rangle = \int dx'' \langle x'|\underbrace{U(\xi)|x''\rangle}_{|x''+\xi\rangle}\langle x''|\psi\rangle$

$$= \int dx''\, \delta(x''+\xi-x')\, \psi(x'') = \psi(x'-\xi) \qquad (70.3)$$

↳ $\varphi(x') = \langle x'|\varphi\rangle = \langle x'|U(\xi)|\psi\rangle = \psi(x'-\xi)$



Eqs. (70.2) e (70.3) : $U(\xi)$: op. de translação espacial em 1-D

De fato, temos que (detalhes no Cap. 15):

$$U(\vec{a}) = e^{-i\vec{a}\cdot\vec{p}/\hbar} \quad : \text{op. de translação espacial} \qquad (71.1)$$

→ gerador de translações espaciais

: comparar Eq. (52.1)

· Operador de evolução temporal.

Lembrar tempo t : parâmetro na mecânica quântica

considerar: $|\psi(t_0)\rangle$: estado do sistema instante t_0 e
$|\psi(t)\rangle$: " " " " t ; $t_0 < t$

hipóteses: (1) $|\psi(t)\rangle$ é determinado a partir de $|\psi(t_0)\rangle$:
: princípio de causalidade válido na M.Q. ;

(2) princípio de superposição (53.1) válido p/ intervalo (t_0, t)

↳ podemos definir operador linear $U(t,t_0)$, tal que

$$|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle \qquad (71.2)$$

$U(t,t_0)$: op. de evolução temporal

próxima etapa: determinar forma $U(t,t_0)$.

Obs.: Sec VIII.8 Messiah: $U(t,t_0)$ derivado p/ sistema conservativo
+ postulado → operador obtido válido p/ caso geral;

p/ detalhes da discussão abaixo, veja Sec. 14.1, Merzbacher.

notar propriedades op. $U(t,t_0)$:

(i) $U(t,t) = 1$ (72.1)

(ii) $|\psi(t_2)\rangle = U(t_2,t_1)|\psi(t_1)\rangle = U(t_2,t_1)U(t_1,t_0)|\psi(t_0)\rangle = U(t_2,t_0)|\psi(t_0)\rangle$

↳ $U(t_2,t_0) = U(t_2,t_1)U(t_1,t_0)$ (72.2)

Eq. (72.2) : $U(t_0,t_0) = U(t_0,t)U(t,t_0) = 1 \rightarrow U^{-1}(t,t_0) = U(t_0,t)$

e $U(t,t) = U(t,t_0)U(t_0,t) = 1$ (72.3)

· p/ $\varepsilon \in \mathbb{R}$ e $|\varepsilon| \ll 1$, podemos escrever:

$U(t+\varepsilon,t) = 1 - \frac{i}{\hbar}\varepsilon H(t)$ (72.4)

operador linear definido a posteriori

Eqs. (72.2) e (72.4) :

$U(t+\varepsilon,t_0) = U(t+\varepsilon,t)U(t,t_0) = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\varepsilon H(t)\right)U(t,t_0)$

↳ $\frac{1}{\varepsilon}\left(U(t+\varepsilon,t_0) - U(t,t_0)\right) = -\frac{i}{\hbar}H(t)U(t,t_0)$

se $\varepsilon \rightarrow 0$:

$i\hbar \frac{dU(t,t_0)}{dt} = H(t)U(t,t_0)$: equação de movimento p/ op. $U(t,t_0)$ (72.5)

⊕ condição inicial : $U(t_0,t_0) = 1$

sobre op. $H(t)$: verifica-se que p/ sistema que possui um análogo clássico, op. $H(t)$ é similar (forma) da função hamiltoniana (veja discussão abaixo)

· p/ estado $|\psi(t)\rangle$,

como $|\psi(t+\varepsilon)\rangle = U(t+\varepsilon,t)|\psi(t)\rangle$,

em ordem ε^1, temos que

$$|\psi(t)\rangle + \varepsilon \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H(t)\right)|\psi(t)\rangle$$

↳ $i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle$: eq. de movimento p/ estado $|\psi(t)\rangle$: Eq. de Schrödinger (73.1)

· hipótese : $H(t)$ operador hermitiano ;

↳ Eq. (72.5) : $-i\hbar \frac{dU^\dagger(t,t_0)}{dt} = U^\dagger(t,t_0) H(t)$ (*)

(73.2)

Eq. (73.1) : $-i\hbar \frac{d}{dt}\langle\psi(t)| = \langle\psi(t)| H(t)$ (**)

notar: $U^\dagger(t,t_0)$ + Eq. (72.5) − (*) + $U(t,t_0)$:

$$i\hbar\, U^\dagger(t,t_0)\frac{dU(t,t_0)}{dt} + i\hbar \frac{dU^\dagger(t,t_0)}{dt} U(t,t_0) = 0$$

$$\frac{d}{dt}\left(U^\dagger(t,t_0)U(t,t_0)\right) = 0 \rightarrow U^\dagger(t,t_0)U(t,t_0) = O \neq O(t)$$

como $U(t,t) = 1 \rightarrow U^\dagger(t,t_0)U(t,t_0) = 1$: $U(t,t_0)$ é um op. unitário se $H(t)$ op. hermitiano. (73.3)

↳ $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t_0)|U^\dagger(t,t_0)U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle$:

: norma do estado é preservada durante evolução temporal !

· solução formal Eq. (72.5) :

$$U(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H(t')\, U(t',t_0) \qquad (74.1)$$

iterando Eq. (74.1), temos que

$$U(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\, H(t_1) + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, H(t_1)\, H(t_2) +$$

$$+ \ldots + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\, H(t_1)\, H(t_2) \ldots H(t_n) + \ldots$$

a eq. acima pode ser escrita como (p/ detalhes, veja pg.)

$$U(t,t_0) = \sum_{n\geq 0} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t} dt_n\, T\left[H(t_1)\, H(t_2) \ldots H(t_n)\right] \qquad (74.2)$$

$T\left[H(t_1)\, H(t_2) \ldots H(t_n)\right]$: produto cronológico operadores $H(t_1), H(t_2), \ldots, H(t_n)$

$$\text{Ex.}: \quad T\left[H(t_1)\, H(t_2)\right] = \begin{cases} H(t_1)\, H(t_2), & \text{se } t_2 < t_1 \\ H(t_2)\, H(t_1), & \text{se } t_2 > t_1 \end{cases} \qquad (74.3)$$

Obs. Eq. (74.2) : notar os limites de integração !

hipótese : $H \neq H(t)$: sistema conservativo,

$$\text{Eq. (74.2)}: \quad U(t,t_0) = \sum_{n\geq 0} \frac{1}{n!}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n H^n (t-t_0)^n = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \qquad (74.4)$$

comparar Eqs. (52.1) e (74.4) :

se H op. hermitiano $\rightarrow$ U é op. unitário !

Obs.: notar similaridade na forma op. de evolução temporal p/ sistemas conservativos (74.4) e o op. de translação espacial (71.1).

· p/ um sistema conservativo, $H \neq H(t)$, a eq. de movimento (73.1) pode ser resolvida utilizando o ansatz:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t)|n\rangle \tag{75.1}$$

onde $H|n\rangle = E_n|n\rangle$

Eq. (75.1) em (73.1): $i\hbar \sum_n \frac{dC_n(t)}{dt}|n\rangle = \sum_n C_n(t) H|n\rangle = \sum_n C_n(t) E_n|n\rangle$

$\hookrightarrow \sum_n \left(i\hbar \frac{dC_n}{dt} - E_n C_n \right)|n\rangle = 0 \rightarrow i\hbar \frac{dC_n}{dt} = E_n C_n$

$\hookrightarrow C_n(t) = C_n(t_0)\, e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}$

Eq. (75.1): $$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t_0)\, e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}|n\rangle \tag{75.2}$$

notar:

(i) o estado $|\psi(t)\rangle$ em um sistema conservativo pode ser obtido através da solução do problema de autovalores (independente do tempo) (75.1);

(ii) Eq. (75.2) em acordo c/ Eq. (74.4).

(iii) caso particular: se $|\psi(t_0)\rangle = |m\rangle \rightarrow C_n(t_0) = \delta_{n,m}$

$\hookrightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-iE_m(t-t_0)}|m\rangle$: estado estacionário (75.3)

· novamente, caso geral, $H(t)$: Eq. (73.1) permite determinar a evolução temporal do valor esperado de um observável A: útil relação c/ resultados experimentais / clássicos;

notar: $$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \underbrace{\left(i\hbar \frac{d\langle \psi(t)|}{dt} \right)}_{\text{Eq. (73.2)} \;=\; -\langle \psi(t)| H(t)} A | \psi(t) \rangle +$$

$$+ \langle \psi(t) | A \underbrace{\left(\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} i\hbar \right)}_{\text{Eq. (73.1)} \;=\; H(t)|\psi(t)\rangle} + \langle \psi(t) | \frac{\partial A}{\partial t} | \psi(t) \rangle$$

↳ $$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$: eq. de movimento $\langle A \rangle$ (76.1)

notar: se $A \neq A(t)$ e $[A, H] = 0$ → $\langle A \rangle$ é cte no tempo
↳ observável A é uma constante de movimento

· considerar Eq. (76.1) p/ partícula massa m, movimento em 1-D; (pg. 64)

Eq. (76.1) p/ $A = x$ e $A = p$:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [x, H] \rangle \quad \text{e} \quad \frac{d\langle p \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [p, H] \rangle \qquad (76.2)$$

Lembrar: descrição sistema clássico análogo no formalismo hamiltoniano:

$$\dot{x}_c = \frac{\partial H_c}{\partial p_c} \quad \text{e} \quad \dot{p}_c = -\frac{\partial H_c}{\partial x_c}$$: Eqs. de Hamilton (76.3)

onde

$$H_c = H_c(x_c, p_c) = \frac{p_c^2}{2m} + V(x_c)$$: hamiltoniana

é possível relacionar Eqs. (76.2) e (76.3) via o princípio de correspondência (59.1):

$$\lim_{\hbar \to 0} \frac{1}{i\hbar} \langle [x, H] \rangle = \frac{\partial H_c}{\partial p_c} \quad e \quad \lim_{\hbar \to 0} \frac{1}{i\hbar} \langle [p, H] \rangle = -\frac{\partial H_c}{\partial x_c} \qquad (77.1)$$

como: $[x, H] = i\hbar \dfrac{\partial H}{\partial p}$ e $[p, H] = -i\hbar \dfrac{\partial H}{\partial x}$ (77.2)

↳ Eq. (77.1) ok se postulados de quantização (60.1) e (60.2) ok!

Obs.: a discussão acima exemplifica a consistência da relação entre op. $H(t)$ e a função hamiltoniana do sistema clássico análogo.

· Eq. (76.1) pode ser utilizada p/ discutir, em detalhes, a relação de incerteza tempo-energia:

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \hbar \qquad (77.3)$$

Lembrar que a interpretação (77.3) é diferente de $\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar/2$ pois, nesse caso, temos uma relação que envolve as incertezas nas medidas de x e p no mesmo instante t.

considerar Eq. (61.2) p/ op. hamiltoniano $H \neq H(t)$ e observável $A \neq A(t)$:

$$\Delta A \, \Delta H = \Delta A \, \Delta E \geq \tfrac{1}{2} \langle [A, H] \rangle \overset{\text{Eq. (76.1)}}{=} \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d\langle A \rangle}{dt} \right|$$

$$\hookrightarrow \quad \frac{\Delta A}{\left| d\langle A \rangle / dt \right|} \cdot \Delta E \geq \hbar/2 \qquad (77.4)$$

podemos definir:

$\tau_A \equiv \dfrac{\Delta A}{|d\langle A\rangle/dt|}$: escala de tempo característica da evolução temporal da distribuição de probabilidades $P(a_n) = \langle\psi(t)|P_n|\psi(t)\rangle$: Eq. (57.1)

ou

(I) = intervalo de tempo característico p/ modificação do sistema.

↳ interpretação (77.3) : a incerteza na medida da energia do sistema está relacionada ao (I) !

· Versões da mecânica quântica (pictures of quantum mechanics).

Obs. Messiah : "Representations" = pictures !

A descrição de um sistema quântico através da formulação discutida acima é caracterizada por:

(i) $|\psi(t_0)\rangle \xrightarrow{U(t,t_0)} |\psi(t)\rangle$: é atribuída uma evolução temporal ao estado do sistema e

(ii) $A \neq A(t)$: em geral, observáveis são estacionários exceto por dependência temporal explícita; (78.1)

essa formulação é denominada versão de Schrodinger da M.Q.

Entretanto, como o vetor $|\psi(t)\rangle$ é um objeto auxiliar na descrição do sistema quântico, formulações alternativas são possíveis, desde que:

(i) espectro de autovalores dos observáveis seja preservado e (78.2)

(ii) produto escalar entre autovetores $|n\rangle$ e estado do sistema $|\psi\rangle$, i.e., $\langle n|\psi\rangle$ seja preservado.

Eq. (78.2) → quantidades físicas (possíveis valores observáveis e suas probabilidades de observação) sejam iguais em quaisquer formulações;
condição (78.2) pode ser satisfeita via uma transformação unitária !

notação:

$|\psi(t)\rangle \to |\psi_S(t)\rangle$: estado do sistema na versão Schrödinger
$A \to A_S$: observável " " "

↳ Eq. (71.2) : $|\psi_S(t)\rangle = U(t,t_0)|\psi_S(t_0)\rangle$

Define-se:

$\cdot\ |\psi_H\rangle = U^\dagger(t,t_0)|\psi_S(t)\rangle = U^\dagger(t,t_0)U(t,t_0)|\psi_S(t_0)\rangle$; (79.1)

$\cdot\ A_H(t) = U^\dagger(t,t_0)\,A_S\,U(t,t_0)$ (79.2)

Eq. (79.1) : estado do sistema na versão de Heisenberg da M.Q.
Eq. (79.2) : observável " " " " " "

nesse caso:
(i) estado do sistema descrito por estado estacionário $|\psi_H\rangle$ e
(79.3)
(ii) observáveis $A_H(t)$ apresentam evolução temporal de acordo c/ Eq. (80.1).

Comparar (78.2) e (79.3) !

· sobre a evolução temporal de $A_H(t)$,

$i\hbar \dfrac{d}{dt}$ Eq. (79.2) :

$$i\hbar\frac{dA_H}{dt} = \underbrace{\left(i\hbar\frac{dU^\dagger}{dt}\right)}_{\text{Eq. (73.2)}\ = -U^\dagger H} A_S U + i\hbar U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U + U^\dagger A_S \underbrace{\left(i\hbar\frac{dU}{dt}\right)}_{\text{Eq. (72.5)}\ = HU}$$

$$= U^\dagger A_S H U - U^\dagger H A_S U + i\hbar U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U$$

$$= U^\dagger A_S U U^\dagger H U - U^\dagger H U U^\dagger A_S U + i\hbar U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U$$

definindo: $H_H = U^\dagger H U$: op. hamiltoniano na versão Heisenberg

$$\frac{\partial A_H}{\partial t} = U^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U$$

↳ $i\hbar\frac{dA_H}{dt} = [A_H, H_H] + i\hbar\frac{\partial A_H}{\partial t}$: equação de Heisenberg (80.1)

· sobre as condições (78.2),

se $A_S|n_S\rangle = a_n|n_S\rangle$

↳ $U^\dagger(t,t_0)A_S U(t,t_0)\left(U^\dagger(t,t_0)|n_S\rangle\right) = a_n\left(U^\dagger(t,t_0)|n_S\rangle\right)$

↳ $A_H(t)|n_H(t)\rangle = a_n|n_H(t)\rangle$

notar: condição (i) OK, porém autovetores apresentam evolução temporal ~ como $A_H = A_H(t)$

↳ base evolui temporalmente.

$\langle n_H(t)|\psi_H\rangle = \langle n_S|U(t,t_0)U^\dagger(t,t_0)|\psi_S\rangle = \langle n_S|\psi_S\rangle$:

: condição (ii) OK !

· notar:

se $\frac{\partial A_H}{\partial t} = 0$ e $[A_H, H_H] = 0$

↳ Eq. (80.1) → $\frac{dA_H(t)}{dt} = 0$ → observável A é uma constante de movimento

nesse caso: $A_H(t) = A_H(t_0) = A_S = A$

↳ conjunto de autovetores de A_H $|\Omega_H\rangle$ são cte no tempo!

· versão de Heisenberg: interessante p/ determinar relação clássico-quântico pois

M.C.: estado do sistema descrito variaveis dinâmicas $\vec{r} = \vec{r}(t)$, $\vec{p} = \vec{p}(t)$, ... e

versão de Heisenberg M.Q.: observáveis $A_H = A_H(t)$;

similar pg. 60, considerar sistema quântico c/ análogo clássico e 2N observáveis

q: $q_1, q_2, \ldots, q_N$: coordenadas e

p: $p_1, p_2, \ldots, p_N$: momentos tais que

$$[q_i, q_j] = [p_i, p_j] = 0 \quad e \quad [q_i, p_j] = i\hbar$$

Eq. (80.1):
$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[q_i, H] = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

Eq. (77.2) (81.1)

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[p_i, H] = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad ; \; i = 1, 2, \ldots, N$$

notar: Eq. (81.1) formalmente idênticas às correspondentes eqs. (clássicas) de Hamilton!

Obs.: notar similaridade discussão acima c/ Eq. (77.1): versão de Schrödinger.

Alternativa: Lembrar que variavel dinâmica clássica $A_c = A_c(q, p, t)$, no formalismo hamiltoniano, eq. de movimento (veja Sec. 9.6, Goldstein):

$$\frac{dA_c}{dt} = \{A_c, H_c\} + \frac{\partial A_c}{\partial t} \qquad (81.2)$$

onde $\{A, H\} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}$: Parênteses de Poisson de A e H.

identificando : $\frac{1}{i\hbar}[A_H, H_H] \rightarrow \{A_c, H_c\}$

↳ Eqs. (80.1) e (81.2) são formalmente idênticas!

· novamente: evolução temporal do valor esperado.

notar: $\langle\psi_s(t)|A_s|\psi_s(t)\rangle = \langle\psi_s(t)|UU^\dagger A_s UU^\dagger|\psi_s(t)\rangle$

$$= \langle\psi_H|A_H(t)|\psi_H\rangle \qquad (82.1)$$

↳ $\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\langle\psi_H|A_H|\psi_H\rangle = \langle\psi_H|\frac{dA_H}{dt}|\psi_H\rangle$

$$\overset{\text{Eq. (80.1)}}{=} \underbrace{\frac{1}{i\hbar}\langle\psi_H|[A_H, H_H]|\psi_H\rangle} + \underbrace{\langle\psi_H|\frac{\partial A_H}{\partial t}|\psi_H\rangle}$$

Eq. (82.1) : $= \langle\psi_s(t)|[A_s, H]|\psi_s(t)\rangle \qquad \cdot \langle\psi_s(t)|\partial A_s/\partial t|\psi_s(t)\rangle$

↳ $\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle + \langle\partial A/\partial t\rangle$: Eq. (76.1) !

· versão de interação.

Obs. Messiah: Intermediate "Representation"

Formulação intermediária entre versões de Schrödinger e de Heisenberg; nesse caso tanto estados quanto observáveis: dependentes do tempo.

ideia: separar o problema original em duas partes:

$$H = H_0 + V \qquad (82.2)$$

onde H_0 : solução conhecida, em geral, $H_0 \neq H_0(t)$ e
V : termo de interação.

define-se op. unitário $U_0(t,t_0)$, sol. eq. de movimento:

$$i\hbar \frac{dU_0(t,t_0)}{dt} = H_0 U_0(t,t_0) \quad \oplus \quad \text{c.i.}: U(t_0,t_0) = 1 \qquad (83.1)$$

e

$|\psi_I(t)\rangle = U_0^\dagger(t,t_0)|\psi_S(t)\rangle$: estado do sistema versão de interação (83.2)

$A_I(t) = U_0^\dagger(t,t_0) A_S U_0(t,t_0)$: observável " " " (83.3)

↳ eqs. de movimento:

(i) $$i\hbar \frac{d|\psi_I(t)\rangle}{dt} = \underbrace{i\hbar \frac{dU_0^\dagger}{dt}}_{= -U_0^\dagger H_0 \text{ (Eq. (83.1))}} |\psi_S(t)\rangle + U_0^\dagger \underbrace{\left(i\hbar \frac{d|\psi_S(t)\rangle}{dt} \right)}_{= H(t)|\psi_S(t)\rangle \text{ (Eq. (73.1))}}$$

$$= \left(-U_0^\dagger H_0 U_0 + U_0^\dagger (H_0 + V) U_0 \right) U_0^\dagger |\psi_S(t)\rangle$$

↳ $$i\hbar \frac{d|\psi_I(t)\rangle}{dt} = V_I(t)|\psi_I(t)\rangle$$: eq. de movimento p/ estado $|\psi_I(t)\rangle$ (83.4)

(ii) $$i\hbar \frac{dA_I}{dt} = \underbrace{\left(i\hbar \frac{dU_0^\dagger}{dt} \right)}_{= -U_0^\dagger H_0} A_S U_0 + \underbrace{i\hbar U_0^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U_0}_{\partial A_I/\partial t} + U_0^\dagger A_S \underbrace{\left(i\hbar \frac{dU_0}{dt} \right)}_{= H_0 U_0}$$

$$= U_0^\dagger A_S U_0 \underbrace{U_0^\dagger H_0 U_0}_{= H_{0,I}} - U_0^\dagger H_0 U_0 U_0^\dagger A_S U_0 + i\hbar\, \partial A_I/\partial t$$

↳ $i\hbar \frac{dA_I}{dt} = [A_I, H_{0,I}] + i\hbar \frac{\partial A_I}{\partial t}$: eq. de movimento p/ observável $A_I(t)$ (84.1)

notar Eqs. (83.4) e (84.1) :

$|\psi_I(t)\rangle$: evolução temporal ~ termo de interação V
$A_I(t)$: " " " " não-interagente H_0

· se $H_0 \neq H_0(t)$ → solução Eq. (83.1) = Eq. (74.4), i.e.,

$$U_0(t, t_0) = e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar} \qquad (84.2)$$

Obs.: versão de interação útil p/ teoria de perturbação dependente do tempo.

· Representações de coordenada e momento,
(p/ detalhes, veja Sec. 15.1, Merzbacher)

Obs. notação Messiah Secs. VIII.16 e VIII.17 : $q \to r$
ideia : generalizar discussão exemplo pg. 69 : 1D → 3D.

considerar : partícula massa m, movimento em 3-D e operadores posição $\vec{r}$ e momento $\vec{p}$ tais que, Eq. (60.1) :

$$[r_i, r_j] = [p_i, p_j] = 0 \quad e \quad [r_i, p_j] = i\hbar \,, \quad i,j = 1,2,3 \qquad (84.3)$$

ou, em forma compacta : $\vec{r}\vec{p} - \vec{p}\vec{r} = i\hbar \hat{1}$ (84.4)

Eq. (84.3) : ops. $\vec{r}$ e $\vec{p}$: observáveis canonicamente conjugados ; novamente :
op. posição $\vec{r}$: conjunto completo de observáveis que comutam ;
" momento $\vec{p}$: " " " " " " .

· similar caso 1-D, p/ op. posição $\vec{r}$, temos que:

$$\vec{r}\,|\vec{r}\,'\rangle = \vec{r}\,'\,|\vec{r}\,'\rangle \quad ; \quad -\infty < r' < +\infty$$

$$\langle \vec{r}\,''|\vec{r}\,'\rangle = \delta(\vec{r}\,'-\vec{r}\,'')$$: condição de ortonormalidade

(85.1)

$$\int d^3r'\,|\vec{r}\,'\rangle\langle\vec{r}\,'| = 1$$: relação de completeza

↳ vetores $|\vec{r}\,'\rangle$: base p/ espaço de Hilbert.

Eq. (85.1) : eqs. fundamentais da representação de coordenadas

Obs. notação Eq. (85.1) : de fato, temos que

$$|\vec{r}\,'\rangle = |r'_1\rangle|r'_2\rangle|r'_3\rangle = |r'_1\,r'_2\,r'_3\rangle = |x\rangle|y\rangle|z\rangle = |x\,y\,z\rangle$$

Eq. autovalores : $r_i|r'_1\,r'_2\,r'_3\rangle = r'_i|r'_1\,r'_2\,r'_3\rangle$; $i = 1, 2, 3$

$$\langle\vec{r}\,''|\vec{r}\,'\rangle = \delta(r''_1 - r'_1)\,\delta(r''_2 - r'_2)\,\delta(r''_3 - r'_3) = \delta(x''-x')\,\delta(y''-y')\,\delta(z''-z')$$

$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \otimes \mathcal{E}_3 = \mathcal{E}_x \otimes \mathcal{E}_y \otimes \mathcal{E}_z$: veja pgs. 18-20.

p/ estado arbitrário $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$, temos que

$$|\psi\rangle = \int d^3r'\,|\vec{r}\,'\rangle\langle\vec{r}\,'|\psi\rangle = \int d^3r'\,\psi(\vec{r}\,')\,|\vec{r}\,'\rangle \qquad (85.2)$$

: representação de coordenadas vetor $|\psi\rangle$

$\psi(\vec{r}\,') = \langle\vec{r}\,'|\psi\rangle$: função de onda, mecânica ondulatória

↳ produto escalar:

$$\langle\psi_a|\psi_b\rangle = \int d^3r'\,\langle\psi_a|\vec{r}\,'\rangle\langle\vec{r}\,'|\psi_b\rangle = \int d^3r'\,\psi_a^*(\vec{r}\,')\,\psi_b(\vec{r}\,') \qquad (85.3)$$

· similar p/ operador A,

$$A|\psi\rangle = 1\cdot A\cdot 1|\psi\rangle = \int d^3r'd^3r'' \, |\vec{r}'\rangle\langle\vec{r}'|A|\vec{r}''\rangle\langle\vec{r}''|\psi\rangle$$

$$= \int d^3r'd^3r'' \, |\vec{r}'\rangle \langle\vec{r}'|A|\vec{r}''\rangle \psi(\vec{r}'') \; ; \qquad (86.1)$$

em geral, operador $A = A(\vec{r},\vec{p})$: lembrar regra de simetrização (60.3)!

· vamos considerar em detalhes $\langle\vec{r}'|A|\vec{r}''\rangle$: elemento matriz que representa op. A na rep. de coordenadas;

notar: $\langle\vec{r}'|\vec{r}|\vec{r}''\rangle = \vec{r}''\langle\vec{r}'|\vec{r}''\rangle = \vec{r}''\,\delta(\vec{r}'-\vec{r}'')$

$$\hookrightarrow \langle\vec{r}'|\vec{r}|\psi\rangle = \int d^3r'' \langle\vec{r}'|\vec{r}|\vec{r}''\rangle\langle\vec{r}''|\psi\rangle$$

$$= \int d^3r'' \; \vec{r}''\,\delta(\vec{r}'-\vec{r}'')\,\psi(\vec{r}'') = \vec{r}'\,\psi(\vec{r}') \qquad (86.2)$$

se op. $V = V(\vec{r}) \rightarrow \langle\vec{r}'|V(\vec{r})\psi\rangle = V(\vec{r}')\,\psi(\vec{r}')$: Eq. (35.1)

· considerar o op. momento $\vec{p}$,

Eq. (84.3) : $\langle\vec{r}'|r_ip_i - p_ir_i|\vec{r}''\rangle = (r'_i - r''_i)\langle\vec{r}'|p_i|\vec{r}''\rangle = i\hbar\langle\vec{r}'|\vec{r}''\rangle$

$$\hookrightarrow \langle\vec{r}'|p_i|\vec{r}''\rangle = \frac{i\hbar\,\delta(\vec{r}'-\vec{r}'')}{r'_i - r''_i} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial r'_i}\delta(\vec{r}'-\vec{r}'')$$

identidade $x\delta'(x) = -\delta(x)$

$$\hookrightarrow \langle\vec{r}'|\vec{p}|\vec{r}''\rangle = -i\hbar\vec{\nabla}'\,\delta(\vec{r}'-\vec{r}'') \qquad (86.3)$$

$$\cdot \langle\vec{r}'|p_i|\psi\rangle = \int d^3r'' \langle\vec{r}'|p_i|\vec{r}''\rangle\langle\vec{r}''|\psi\rangle = \int d^3r'' \,(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial r'_i}\delta(\vec{r}'-\vec{r}'')\,\psi(\vec{r}'')$$

tilibra

$$= -i\hbar \frac{\partial}{\partial r'_i} \int d^3r'' \, \delta(\vec{r}' - \vec{r}'') \psi(\vec{r}'') = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r'_i} \psi(\vec{r}')$$

↳ $$\langle \vec{r}' | \vec{p} | \psi \rangle = -i\hbar \vec{\nabla}' \psi(\vec{r}') \qquad (87.3)$$

· $$\langle \vec{r}' | p_i p_j | \vec{r}'' \rangle = \int d^3r''' \langle \vec{r}' | p_i | \vec{r}''' \rangle \langle \vec{r}''' | p_j | \vec{r}'' \rangle$$

$$= (-i\hbar)^2 \int d^3r''' \frac{\partial}{\partial r'_i} \delta(\vec{r}' - \vec{r}''') \frac{\partial}{\partial r'''_j} \delta(\vec{r}''' - \vec{r}'')$$

$$= (-i\hbar)^2 \frac{\partial}{\partial r'_i} \int d^3r''' \, \delta(\vec{r}' - \vec{r}''') \frac{\partial}{\partial r'''_j} \delta(\vec{r}''' - \vec{r}'')$$

$$= (-i\hbar)^2 \frac{\partial^2}{\partial r'_i \partial r'_j} \delta(\vec{r}' - \vec{r}'')$$

↳ $F = F(\vec{p})$: op. que pode ser escrito como uma série de potências em $\vec{p}$:

$$\langle \vec{r}' | F(\vec{p}) | \vec{r}'' \rangle = F(-i\hbar \vec{\nabla}') \, \delta(\vec{r}' - \vec{r}'') \qquad (87.4)$$

↳ $$\langle \vec{r}' | F(\vec{p}) | \psi \rangle = \int d^3r'' \langle \vec{r}' | F(\vec{p}) | \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}'' | \psi \rangle$$

$$= \int d^3r'' \, F(-i\hbar \vec{\nabla}') \, \delta(\vec{r}' - \vec{r}'') \langle \vec{r}'' | \psi \rangle$$

$$= F(-i\hbar \vec{\nabla}') \int d^3r'' \, \delta(\vec{r}' - \vec{r}'') \langle \vec{r}'' | \psi \rangle = F(-i\hbar \vec{\nabla}') \langle \vec{r}' | \psi \rangle = F(-i\hbar \vec{\nabla}') \psi(\vec{r}')$$

$$(87.5)$$

↳ caso geral, se operador $A = A(\vec{r}, \vec{p})$:

$$\langle \vec{r}' | A(\vec{r}, \vec{p}) | \psi \rangle = A(\vec{r}', -i\hbar \vec{\nabla}') \langle \vec{r}' | \psi \rangle = A(\vec{r}', -i\hbar \vec{\nabla}') \psi(\vec{r}') \qquad (87.6)$$

Ex.: partícula massa m, sob potencial $V = V(\vec{r})$; temos que

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$$

Eq. (73.1) : $i\hbar \frac{d}{dt} \langle \vec{r}' | \psi(t) \rangle = \langle \vec{r}' | H | \psi(t) \rangle$

$$= \left(\frac{(-i\hbar \vec{\nabla}')^2}{2m} + V(\vec{r}') \right) \langle \vec{r}' | \psi(t) \rangle$$

identificando : $\langle \vec{r}' | \psi(t) \rangle = \psi(\vec{r}', t)$: função de onda dependente t

↳ $i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}', t)}{\partial t} = \left(\frac{-\hbar^2 \nabla'^2}{2m} + V(\vec{r}') \right) \psi(\vec{r}', t)$: Eq. de Schrödinger dependente t (88.1)

· similar, eqs. fundamentais da representação de momento

$\vec{p} | \vec{p}' \rangle = \vec{p}' | \vec{p}' \rangle$; $-\infty < p' < +\infty$

$\langle \vec{p}'' | \vec{p}' \rangle = \delta(\vec{p}'' - \vec{p}')$: condição de ortonormalidade (88.2)

$\int d^3p' \, | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | = 1$: relação de completeza

↳ vetores $| \vec{p}' \rangle$: base p/ espaço de Hilbert

· sobre o problema de autovalores :

$\langle \vec{r}' | \vec{p} | \vec{p}' \rangle = -i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{r}'} \langle \vec{r}' | \vec{p}' \rangle = \vec{p}' \langle \vec{r}' | \vec{p}' \rangle$

definindo : $\psi_{\vec{p}'}(\vec{r}') = \langle \vec{r}' | \vec{p}' \rangle$

↳ $-i\hbar \vec{\nabla}' \psi_{\vec{p}'}(\vec{r}') = \vec{p}' \psi_{\vec{p}'}(\vec{r}') \rightarrow \psi_{\vec{p}'}(\vec{r}') = g(\vec{p}') e^{i \vec{p}' \cdot \vec{r}' / \hbar}$

como $\langle \vec{p}' | \vec{p}'' \rangle = \delta(\vec{p}' - \vec{p}'') = \int d^3r' \langle \vec{p}' | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \vec{p}'' \rangle$

$$= g^*(\vec{p}') g(\vec{p}'') \int d^3r' \, e^{i(\vec{p}'' - \vec{p}') \cdot \vec{r}' / \hbar} = |g(\vec{p}')|^2 (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p}' - \vec{p}'')$$

↳ $\psi_{\vec{p}'}(\vec{r}') = \langle \vec{r}' | \vec{p}' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i \vec{p}' \cdot \vec{r}' / \hbar}$: comparar Eq. (68.3) (88.3)

Eq. (68.3) : $\langle \vec{r}' | \vec{p}' \rangle$: elemento matriz de transformação s base $|\vec{p}'\rangle$ p/ base $|\vec{r}'\rangle$

· p/ vetor arbitrário $|\psi\rangle \in \varepsilon$,

$$|\psi\rangle = \int d^3p' \, |\vec{p}'\rangle\langle\vec{p}'|\psi\rangle = \int d^3p' \, \phi(\vec{p}')\, |\vec{p}'\rangle$$: representação de momento vetor $|\psi\rangle$ (89.1)

onde $\phi(\vec{p}') \equiv \langle \vec{p}'|\psi\rangle$: função de onda na rep. de momento

Eq. (88.3) : permite determinar a relação entre $\psi(\vec{r}')$ e $\phi(\vec{p}')$:

$$\psi(\vec{r}') = \langle \vec{r}'|\psi\rangle = \int d^3p' \, \langle\vec{r}'|\vec{p}'\rangle\langle\vec{p}'|\psi\rangle = \int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \, e^{i\vec{p}'\cdot\vec{r}'/\hbar}\, \phi(\vec{p}')$$

e

$$\phi(\vec{p}') = \langle\vec{p}'|\psi\rangle = \int d^3r' \, \langle\vec{p}'|\vec{r}'\rangle\langle\vec{r}'|\psi\rangle = \int \frac{d^3r'}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \, e^{-i\vec{p}'\cdot\vec{r}'/\hbar}\, \psi(\vec{r}')$$:

: transformada de Fourier! (89.2)

· p/ operador A,

$$A|\psi\rangle = 1\cdot A\cdot 1|\psi\rangle = \int d^3p' d^3p'' \, |\vec{p}'\rangle\langle\vec{p}'|A|\vec{p}''\rangle\langle p''|\psi\rangle$$

$$= \int d^3p' d^3p'' \, |\vec{p}'\rangle\langle\vec{p}'|A|\vec{p}''\rangle\, \phi(\vec{p}'')$$

Exercício: seguir procedimento Eqs. (86.3) -- (87.5) e mostrar que:

$$\langle\vec{p}'|\vec{r}|\vec{p}''\rangle = +i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{p}'}\, \delta(\vec{p}'-\vec{p}'')$$

(89.3)

$$\langle\vec{p}'|A(\vec{r},\vec{p})|\psi\rangle = A(+i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{p}'}, \vec{p}')\langle\vec{p}'|\psi\rangle = A(+i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{p}'}, \vec{p}')\, \phi(\vec{p}')$$

novamente, exemplo pg. 87:

Eq. (73.1): $i\hbar \frac{d}{dt} \langle \vec{p}' | \psi(t) \rangle = \langle \vec{p}' | H | \psi(t) \rangle$

como: $\langle \vec{p}' | p^2 | \psi(t) \rangle = p'^2 \langle \vec{p}' | \psi(t) \rangle = p'^2 \phi(\vec{p}')$;

$$\langle \vec{p}' | V(\vec{r}) | \psi(t) \rangle = \int d^3p'' \, \langle \vec{p}' | V(\vec{r}) | \vec{p}'' \rangle \langle \vec{p}'' | \psi(t) \rangle ;$$

$$\langle \vec{p}' | V(\vec{r}) | \vec{p}'' \rangle = \int d^3r' \, d^3r'' \, \langle \vec{p}' | \vec{r}' \rangle \underbrace{\langle \vec{r}' | V(\vec{r}) | \vec{r}'' \rangle}_{V(\vec{r}'') \, \delta(\vec{r}' - \vec{r}'')} \langle \vec{r}'' | \vec{p}'' \rangle$$

$$= \int d^3r' \, \langle \vec{p}' | \vec{r}' \rangle V(\vec{r}') \langle \vec{r}' | \vec{p}'' \rangle = \int \frac{d^3r'}{(2\pi\hbar)^3} V(\vec{r}') \, e^{-i(\vec{p}' - \vec{p}'')/\hbar} = \bar{V}(\vec{p}' - \vec{p}'')$$

$$\hookrightarrow i\hbar \frac{\partial \phi(\vec{p}', t)}{\partial t} = \frac{p'^2}{2m} \phi(\vec{p}', t) + \int d^3p'' \, \bar{V}(\vec{p}' - \vec{p}'') \, \phi(\vec{p}'', t) : \qquad (90.1)$$

: Eq. de Schrödinger na rep. de momento

Lembrar mecânica ondulatória: eq. de Schrödinger (88.1) é consistente c/ a interpretação probabilística $\psi(\vec{r}, t)$;
notar:

$$\psi^* \left(i\hbar \partial_t \psi = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \psi \right)$$

$\ominus$

$$\psi \left(-i\hbar \partial_t \psi^* = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \psi^* \right) \qquad \text{hipótese}: V(\vec{r}) \in \mathbb{R}$$

$$= i\hbar \left(\psi^* \partial_t \psi + \psi \partial_t \psi^* \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* \right)$$

como: $\psi^* \nabla^2 \psi = \vec{\nabla} \cdot (\psi^* \nabla \psi) - (\vec{\nabla} \psi^*) \cdot (\vec{\nabla} \psi)$

e

$$\psi \nabla^2 \psi^* = \vec{\nabla} \cdot (\psi \vec{\nabla} \psi^*) - (\vec{\nabla} \psi) \cdot (\vec{\nabla} \psi^*)$$

↳ $i\hbar\partial_t|\psi|^2 = \frac{-\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\cdot\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right)$

definindo: $\rho = c|\psi|^2$: densidade de probabilidade

(91.1)

$\vec{J} = \frac{c\hbar}{2mi}\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right)$: densidade de corrente de probabilidade

onde cte $c \in \mathbb{C}$

↳ $i\hbar\partial_t\rho + \vec{\nabla}\cdot\vec{J} = 0$: eq. de continuidade (91.2)
~ conservação probabilidade

é possível escolher cte $c = 1$ e incluir a condição de normalização:

$$\int d^3r\,\rho(\vec{r},t) = \int d^3r\,|\psi(\vec{r},t)|^2 = 1$$

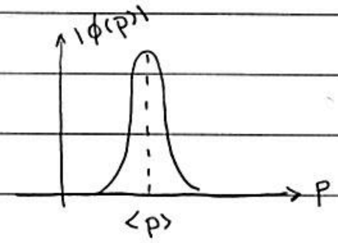
Lembrar: se função ψ é tal que $\int d^3r\,|\psi|^2 < +\infty$
↳ ψ é uma função quadrado integrável : condição p/ funções de onda!

Ex.: partícula livre.
considerar partícula massa m, estado inicial $|\psi(0)\rangle$ tal que:

$$\psi(\vec{r},0) = \langle\vec{r}|\psi(0)\rangle = \int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\,\phi(\vec{p})\,e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$$: Eq. (89.2),

onde $\phi(\vec{p})$: função centrada em torno $\langle\vec{p}\rangle$

Ex. 1-D:



como $H = \frac{p^2}{2m}$ → $[\vec{p}, H] = 0$ → $\vec{p}$ cte de movimento

↳ $\vec{v} = \frac{\langle\vec{p}\rangle}{m}$: velocidade de grupo do pacote de onda = cte

em princípio : $|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle$: Eq. (74.4)

hipótese : $|\bar{\psi}(t)\rangle \equiv e^{-i\vec{p}\cdot\vec{v}t/\hbar}|\psi(0)\rangle$: aproximação estado da partícula em t (92.1)

notar : $\langle\vec{r}|\bar{\psi}(t)\rangle = \langle\vec{r}|e^{-i\vec{p}\cdot\vec{v}t/\hbar}|\psi(0)\rangle$

$$= \int d^3r' \langle\vec{r}|\underbrace{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{v}t/\hbar}|\vec{r}'\rangle}_{=|\vec{r}'+\vec{v}t\rangle}\langle\vec{r}'|\psi(0)\rangle$$

Eq. (66.1)

$$= \int d^3r' \langle\vec{r}|\vec{r}'\rangle\langle\vec{r}'-\vec{v}t|\psi(0)\rangle = \psi(\vec{r}-\vec{v}t, 0)$$, i.e.,

se $|\bar{\psi}(t)\rangle$ estado do sistema em t → pacote de onda se movimenta s/ deformação

próxima etapa: determinar condição p/ (92.1) OK!

de fato, condição : $|\langle\psi|\bar{\psi}\rangle| \simeq 1$

↳ $\langle\psi|\bar{\psi}\rangle = \langle\psi(0)|e^{iHt/\hbar - i\vec{p}\cdot\vec{v}t/\hbar}|\psi(0)\rangle$

$$\overset{\text{Eq. (16.5)}}{=} e^{itmv^2/2\hbar}\underbrace{\langle\psi(0)|\exp\left(it(\vec{p}-m\vec{v})^2/2m\hbar\right)|\psi(0)\rangle}_{(I)}$$

$$(I) = \int d^3p\, d^3p' \langle\psi(0)|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\exp\left(it(\vec{p}-m\vec{v})^2/2m\hbar\right)|\vec{p}'\rangle\langle\vec{p}'|\psi(0)\rangle$$

$$= \int d^3p\, |\phi(\vec{p})|^2 \underbrace{\exp\left(it(\vec{p}-m\vec{v})^2/2m\hbar\right)}_{(II)}$$

como $|\phi(\vec{p})|^2 \neq 0$ p/ $|\vec{p}-\langle\vec{p}\rangle| = |\vec{p}-m\vec{v}| < \Delta p = |\Delta\vec{p}|$,

↳ $|(I)| \simeq 1$ se $(II) \simeq 1$ na região acima, i.e.,

$\frac{(\Delta p)^2 t}{2m\hbar} \ll 1$: condição p/ pacote de onda (partícula livre) propagar s/ deformação.

Obs.: p/ detalhes movimento do pacote de onda, veja Sec. VI.3, Messiah e complementos G_I e J_I, Cohen.

· Operador densidade.

Vimos que

(1) estado do sistema descrito pelo vetor $|\psi(t)\rangle$: nesse caso, o estado do sistema é completamente determinado; sistema descrito por um estado puro $|\psi(t)\rangle$;

por outro lado, se

(2) info sobre o sistema é parcial / incompleta: probabilidades p_i sistema descrito estado $|\psi_i\rangle$, onde vetores $|\psi_i\rangle$ não necessariamente ortogonais,

↳ sistema descrito por uma mistura estatística de estados.

considerar observável A:

se sistema descrito estado puro $|\psi\rangle$

↳ $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$: valor médio medida observável A

(93.1)

se, por outro lado, sistema descrito por uma mistura estatística dos estados $|\psi_i\rangle$, temos que

$$\langle A \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle \qquad (93.2)$$

onde $\sum_i p_i = 1$ e $\langle \psi_i | \psi_i \rangle = 1$.

Eqs. (93.1) e (93.2) : exemplo diferença estado puro e mistura estatística ;

op. densidade : útil p/ descrever uma " " .

Definição : op. densidade :

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| , \qquad (94.1)$$

onde $\langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1$, vetores $|\psi_i\rangle$ não necessariamente $\perp$,

$$p_i \geq 0 \quad e \quad \sum_i p_i = 1$$

nesse caso, temos que:

(1) $\langle A \rangle = Tr(\hat{\rho} A)$ (94.2)

notar: $Tr(\hat{\rho}A) = \sum_i p_i Tr(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|A) = \sum_i p_i Tr(P_i A)$,

onde P_i : projetor subespaço definido por $|\psi_i\rangle$: Eq. (28.1)

como $Tr(P_i A) = Tr(P_i^2 A) = Tr(P_i A P_i)$

$$= Tr\left(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|A|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\right) = \langle\psi_i|A|\psi_i\rangle \underbrace{Tr(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|)}_{= \langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1}$$

veja pg. 44

↳ $Tr(\hat{\rho}A) = \sum_i p_i \langle\psi_i|A|\psi_i\rangle$: Eq. (93.2)

alternativa: se vetores $|n\rangle$: base p/ espaço $\mathcal{E}$, temos que

$$Tr(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|A) = \sum_n \langle n|\psi_i\rangle\langle\psi_i|A|n\rangle = \sum_n \langle\psi_i|A|n\rangle\langle n|\psi_i\rangle$$

$$= \langle\psi_i|A\left(\sum_n |n\rangle\langle n|\right)|\psi_i\rangle = \langle\psi_i|A|\psi_i\rangle$$

↳ caso geral, se $F = F(A)$, verifica-se que

$$\langle F(A) \rangle = Tr(\hat{\rho} F(A)) \qquad (95.1)$$

(2) se op. $A = 1$ $\xrightarrow{\text{Eq. (94.2)}}$ $Tr(\hat{\rho}) = 1$: condição de normalização (95.2)

verifica-se que : $Tr \hat{\rho}^2 \leq 1$ (95.3)

Além das propriedades (1) e (2), temos

(3) $\hat{\rho}$: op. hermitiano ;

(4) $\hat{\rho}$: op. positivo definido :
p/ $\forall\ |\psi\rangle \in \mathcal{E}$, temos que

$p_i \geq 0$

$$\langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle = \sum_i p_i \langle \psi | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \psi \rangle = \sum_i p_i |\langle \psi | \psi_i \rangle|^2 \geq 0 \ : \text{Eq. (22.1)}$$

· verifica-se que $\hat{1} - \hat{\rho}$: op. positivo definido ;
desigualdade de Schwarz (14.1) p/ $|\psi\rangle$ e $|\psi_i\rangle$:

$$|\langle \psi | \psi_i \rangle|^2 \leq \langle \psi | \psi \rangle \underbrace{\langle \psi_i | \psi_i \rangle}_{=1}$$

↳ $\langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle = \sum_i p_i |\langle \psi | \psi_i \rangle|^2 \leq \sum_i p_i \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle \underbrace{\sum_i p_i}_{=1}$

↳ $\langle \psi | 1 - \hat{\rho} | \psi \rangle \geq 0$!

· op. densidade $\hat{\rho}$ também pode ser utilizado p/ descrever um estado puro ;
caso particular, mistura estatística de estados :
$p_i = \delta_{i,1}$; $|\psi_i\rangle = |\psi\rangle$

↳ Eq. (94.1) : $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$: op. densidade p/ sistema descrito estado puro $|\psi\rangle$ (96.1)

nesse caso : $\hat{\rho}^2 = |\psi\rangle\underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{1}\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \hat{\rho}$

↳ $Tr\,\hat{\rho}^2 = 1$ (96.2)

Obs. : lembrar propriedade projetor, Eq. (5.2) : $P_a^2 = P_a$

· 2 critérios p/ distinguir se op. densidade $\hat{\rho}$ corresponde estado puro ou mistura estatística :

(i) se todos estados $|\psi_i\rangle$ em (94.1) são iguais exceto por uma fase : $|\psi_i\rangle = e^{i\alpha_i}|\psi\rangle \to \hat{\rho}$ descreve estado puro;

(ii) se $Tr\,\hat{\rho}^2 = 1 \to \hat{\rho}$ descreve estado puro;
Lembrar que, em geral, $Tr\,\hat{\rho}^2 \leq 1$: Eq. (95.3)

· como tanto uma mistura estatística quanto um estado puro podem ser descritos pelo op. densidade $\hat{\rho}$, podemos reescrever os postulados da mecânica quântica em termos de $\hat{\rho}$:

· postulado (1) : o estado do sistema é descrito por um operador densidade $\hat{\rho}$;

· postulado (3) : a probabilidade $w_n = P(a_n)$ de obtermos o valor a_n quando o observável A é medido em um sistema descrito pelo op. densidade $\hat{\rho}$ é

$$w_n = P(a_n) = Tr(\hat{\rho}P_n) \quad (96.3)$$

onde P_n : projetor subespaço $\mathcal{E}_n$ associado ao autovalor a_n;

postulado (4):

$$\hat{\rho} \xrightarrow[\text{OBSERVÁVEL } A = a_n]{\text{MEDIDA IDEAL}} \frac{P_n \hat{\rho} P_n}{Tr(\hat{\rho} P_n)} \qquad (97.1)$$

como $\hat{\rho}$ é um operador, sua projeção no subespaço $\mathcal{E}_n$ é dada por $P_n \hat{\rho} P_n$; o denominador corresponde à condição de normalização (95.2):

$$Tr(P_n \hat{\rho} P_n) = Tr(\hat{\rho} P_n^2) = Tr(\hat{\rho} P_n).$$

sobre Eq. (96.3): considerar observável A tal que

$A|n\rangle = a_n|n\rangle$; temos que:

Eq. (57.1): $P_i(a_n) = \langle \psi_i | P_n | \psi_i \rangle$: probabilidade medida obs. A igual a_n p/ o estado $|\psi_i\rangle \in$ mistura estatística

↳ p/ mistura estatística:

$$P(a_n) = \sum_i p_i P_i(a_n) = \sum_i p_i \langle \psi_i | P_n | \psi_i \rangle$$: notar similaridade Eq. (93.2)

$$= \sum_i p_i \langle \psi_i | n \rangle \langle n | \psi_i \rangle = \sum_i \langle n | \psi_i \rangle p_i \langle \psi_i | n \rangle$$

$$= \langle n | \hat{\rho} | n \rangle = \sum_m \langle n | m \rangle \langle m | \hat{\rho} | n \rangle = \sum_m \langle m | \hat{\rho} | n \rangle \langle n | m \rangle$$

$$= \sum_m \langle m | \hat{\rho} P_n | m \rangle = Tr(\hat{\rho} P_n)$$

Ex. 1: operador estatístico,

$$\hat{\rho} = \sum_n \frac{e^{-\beta n}}{Z} |n\rangle\langle n|$$

onde $Z = Tr(e^{-\beta H}) = \sum_n e^{-\beta E_n}$: função de partição do sistema $\qquad (97.2)$

Ex. 2 : sistema de 2 níveis.

considerar : observável A : $A|n\rangle = a_n|n\rangle$, $n = 1, 2$;

estado $|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle$; $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$

considerar 2 casos :

(i) sistema descrito estado puro $|\psi\rangle$: $\hat{\rho}_1 = |\psi\rangle\langle\psi|$

(ii) " " mistura estatística estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$

c/ probabilidades $p_1 = |c_1|^2$ e $p_2 = |c_2|^2$:

$\hat{\rho}_2 = |c_1|^2|1\rangle\langle 1| + |c_2|^2|2\rangle\langle 2|$: caso particular (94.1) pois $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$

notar : representação $\hat{\rho}_1$ e $\hat{\rho}_2$ na base $|1\rangle, |2\rangle$:

$$\hat{\rho}_1 = \begin{pmatrix} |c_1|^2 & c_1c_2^* \\ c_2c_1^* & |c_2|^2 \end{pmatrix} \quad \underline{e} \quad \hat{\rho}_2 = \begin{pmatrix} |c_1|^2 & 0 \\ 0 & |c_2|^2 \end{pmatrix}$$

Q. : como distinguir $\hat{\rho}_1$ e $\hat{\rho}_2$?

como $A = \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{pmatrix}$

$\llcorner$ verificar $\rightarrow$ $\langle A\rangle = Tr(\hat{\rho}_1 A) = Tr(\hat{\rho}_2 A) = a_1|c_1|^2 + a_2|c_2|^2$.

i.e., a medida apenas do observável A não é suficiente ;
é necessário considerarmos observável B tal que $[A, B] \neq 0$;

se $B = \begin{pmatrix} b_1 & b_0 \\ b_0 & b_2 \end{pmatrix}$; $[A, B] \neq 0 \rightarrow a_1 \neq a_2$ e $b_0 \neq 0$!

nesse caso (verificar) :

$$\langle B\rangle_1 = Tr(\hat{\rho}_1 B) = b_1|c_1|^2 + b_2|c_2|^2 + 2\,\mathrm{Re}\,(b_0 c_1 c_2^*)$$

$$\langle B\rangle_2 = Tr(\hat{\rho}_2 B) = b_1|c_1|^2 + b_2|c_2|^2$$

· evolução temporal do operador densidade,

considerar: sistema em t_0 descrito pelo op. densidade:

$$\hat{\rho}(t_0) = \sum_i p_i |\psi_i(t_0)\rangle\langle\psi_i(t_0)| \quad : \text{notar: versão de Schrödinger} \qquad (99.1)$$

como $|\psi_i(t)\rangle = U(t,t_0)|\psi_i(t_0)\rangle$: Eq. (71.2)

$$\hookrightarrow \hat{\rho}(t) = \sum_i p_i |\psi_i(t)\rangle\langle\psi_i(t)|$$

$$= \sum_i p_i\, U(t,t_0)|\psi_i(t_0)\rangle\langle\psi_i(t_0)|U^\dagger(t,t_0)$$

$$= U(t,t_0) \sum_i p_i |\psi_i(t_0)\rangle\langle\psi_i(t_0)| U^\dagger(t,t_0)$$

$$= U(t,t_0)\,\hat{\rho}(t_0)\,U^\dagger(t,t_0), \qquad (99.2)$$

i.e., $\hat{\rho}(t_0) \xrightarrow{\text{transf. unitária } U(t,t_0)} \hat{\rho}(t)$

Eqs. (72.5) e (99.2):

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = \underbrace{i\hbar\frac{dU(t,t_0)}{dt}}_{= H(t)U(t,t_0)}\hat{\rho}(t_0)U^\dagger(t,t_0) + U(t,t_0)\hat{\rho}(t_0)\underbrace{\left(i\hbar\frac{dU^\dagger(t,t_0)}{dt}\right)}_{= -U^\dagger(t,t_0)H(t)}$$

$$= H(t)\hat{\rho}(t) - \hat{\rho}(t)H(t)$$

$$\hookrightarrow i\hbar\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = [H(t), \hat{\rho}(t)] \quad : \text{eq. de movimento op. densidade na versão de Schrödinger} \qquad (99.3)$$

notar: op. densidade na versão de Heisenberg:

Eq. (79.2): $\rho_H(t) = U^\dagger(t,t_0)\,\hat{\rho}(t)\,U(t,t_0)$

$$= U^\dagger(t,t_0)\,U(t,t_0)\,\hat{\rho}(t_0)\,U(t,t_0)\,U^\dagger(t,t_0) = \hat{\rho}(t_0) : \qquad (100.1)$$

: op. densidade é estacionário na versão de Heisenberg

notar: equivalente Eq. (82.1),

$$\langle A(t)\rangle = Tr\left(\hat{\rho}(t_0)\,A_H(t)\right) = Tr\left(\hat{\rho}(t_0)\,U^\dagger(t,t_0)\,A_S\,U(t,t_0)\right)$$

$$= Tr\left(U(t,t_0)\,\hat{\rho}(t_0)\,U^\dagger(t,t_0)\,A_S\right) = Tr\left(\hat{\rho}(t)\,A_S\right) \qquad (100.2)$$

· Lembrar mistura estatística: info incompleta/parcial sobre o sistema;
possível medida p/ info parcial: entropia;
considerar op. densidade:

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^{N} p_i\,|\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \underbrace{\sum_{n=1}^{N'} p_n\,|n\rangle\langle n|}_{\text{decomposição espectral } \hat{\rho}} \qquad (100.3)$$

probabilidades (p_i); autovalores op. densidade (p_n)

podemos definir:

(1) $H(\hat{\rho}) = -\sum_{i=1}^{N} p_i \ln p_i$: entropia de Shannon (100.4)

probabilidades!

· p/ estado puro: $p_i = \delta_{i,1} \rightarrow H(\hat{\rho}) = 0$;
· p/ mistura estatística, em particular, p/ mistura equiprovável, $p_i = 1/N$
↳ $H(\hat{\rho}) = -\sum_i \frac{1}{N} \ln N = \ln N$

autovalores!

(2) $\hat{S}(\hat{\rho}) = -\sum_{n=1}^{\tilde{N}'} p_n \ln p_n = -\sum_{n=1}^{\tilde{N}'} \langle n|\hat{\rho}\ln\hat{\rho}|n\rangle$

$= -\mathrm{Tr}(\hat{\rho}\ln\hat{\rho})$: entropia de von Neumann (101.1)

se $\hat{\rho}$: estado puro → autovalores $p_n = 0,1$: lembrar que, nesse caso, $\hat{\rho}$ é um projetor (veja pg. 27)

↳ $S(\hat{\rho}) = 0$: estado puro
$S(\hat{\rho}) > 0$: mistura estatística

notar Eqs. (100.4) e (101.1) : definições distintas;
de fato, verifica-se que $S(\hat{\rho}) \leq H(\hat{\rho})$!

Obs.: p/ sistema em equilíbrio termodinâmico, verifica-se que maximizando (101.1) ⟶ op. estatístico (97.2)
(p/ detalhes, veja Sec. 3.4, Sakurai).

· Operador densidade reduzido,
(p/ detalhes, veja Sec. E$_{III}$, Cohen ou Sec. 6.2, Le Bellac)

considerar: espaço de Hilbert $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$;
vetores $|n_1\rangle$: base p/ subespaço $\mathcal{E}_1$,
" $|n_2\rangle$: " " " $\mathcal{E}_2$,
" $|n_1 n_2\rangle$: " " espaço $\mathcal{E}$ ç

$A = A(1) = A(1) \otimes \hat{1}(2)$: observável associado ao subespaço $\mathcal{E}_1$

↳ $\langle A\rangle = \mathrm{Tr}\left(A(1)\otimes\hat{1}(2)\,\hat{\rho}\right) = \sum_{m_1 m_2} \langle m_1 m_2|A\otimes\hat{1}\,\hat{\rho}|m_1 m_2\rangle$

$= \sum_{\substack{m_1 m_2\\ n_1 n_2}} \langle m_1 m_2|A\otimes 1|n_1 n_2\rangle\langle n_1 n_2|\hat{\rho}|m_1 m_2\rangle$

como: $\langle m_1 m_2 | A \otimes 1 | n_1 n_2 \rangle = A_{m_1 n_1 ; m_2 n_2} = A_{m_1 n_1} \delta_{m_2, n_2}$

e $\langle n_1 n_2 | \hat{\rho} | m_1 m_2 \rangle = \rho_{n_1 m_1 ; n_2 m_2}$: elementos de matriz, Eq. (38.1)

$$\hookrightarrow \langle A \rangle = \sum_{m_1 n_1} A_{m_1 n_1} \sum_{n_2} \rho_{n_1 m_1 ; n_2 n_2} \qquad (102.1)$$

Definição: operador densidade reduzido (do subespaço $\mathcal{E}_1$):

$$\tilde{\rho}(1) = Tr_2 \hat{\rho} = \sum_{\substack{n_1 m_1 \\ n_2}} \rho_{n_1 m_1 ; n_2 n_2} |n_1\rangle\langle m_1| \qquad (102.2)$$

onde Tr_i : traço parcial sob o subespaço $\mathcal{E}_1$

como $\tilde{\rho}(1)_{n_1 m_1} = \sum_{n_2} \rho_{n_1 m_1 ; n_2 n_2}$: elemento de matriz

$$\hookrightarrow \langle A \rangle = \sum_{m_1 n_1} A_{m_1 n_1} \tilde{\rho}(1)_{n_1 m_1} = Tr\left(\tilde{\rho}(1) A(1) \right) \qquad (102.3)$$

op. $\tilde{\rho}(1)$: op. associado apenas ao subespaço $\mathcal{E}_1$, porém possui info sobre o subespaço (correlacionado) $\mathcal{E}_2$.

· notar:

$$\hat{\rho} = \sum_{\substack{n_1 n_2 \\ m_1 m_2}} |n_1 n_2\rangle \langle n_1 n_2 | \hat{\rho} | m_1 m_2 \rangle \langle m_1 m_2|$$

$$\hookrightarrow \tilde{\rho}(1) = \sum_{m'_2} \sum_{\substack{n_1 n_2 \\ m_1 m_2}} \langle n_1 n_2 | \hat{\rho} | m_1 m_2 \rangle |n_1\rangle\langle m_1| \underbrace{\langle m'_2 | n_2 \rangle \langle m_2 | m'_2 \rangle}_{\delta_{m'_2, n_2} \delta_{m_2, m'_2}}$$

$$= \sum_{n_1 m_1} \sum_{m'_2} \langle n_1 m'_2 | \hat{\rho} | m_1 m'_2 \rangle |n_1\rangle\langle m_1|$$

de modo análogo, temos que

$$\tilde{\rho}(2) = Tr_1 \hat{\rho} = \sum_{m'_1} \sum_{\substack{n_1 m_1 \\ n_2 m_2}} \langle n_1 n_2 | \hat{\rho} | m_1 m_2 \rangle \, |n_2\rangle\langle m_2| \underbrace{\langle m'_1 | n_1 \rangle}_{\delta_{m'_1, n_1}} \underbrace{\langle m_1 | m'_1 \rangle}_{\delta_{m'_1, m_1}}$$

$$= \sum_{m'_1} \sum_{n_2 m_2} \langle m'_1 n_2 | \hat{\rho} | m'_1 m_2 \rangle \, |n_2\rangle\langle m_2|$$

Ex. 1 : 2 spins $S = 1/2$ no estado (puro) de singleto (21.1) :

$$|\phi\rangle = 1/\sqrt{2} \left(|+-\rangle - |-+\rangle \right)$$

↳ $\hat{\rho} = |\phi\rangle\langle\phi| = 1/2 \left(|+-\rangle\langle+-| - |+-\rangle\langle-+| - |-+\rangle\langle+-| + |-+\rangle\langle-+| \right)$

ou $\hat{\rho} = 1/2 \Big(|+1\rangle\langle+1| \otimes |-2\rangle\langle-2| - |+1\rangle\langle-1| \otimes |-2\rangle\langle+1|$

$- |-1\rangle\langle+1| \otimes |+2\rangle\langle-2| + |-1\rangle\langle-1| \otimes |+2\rangle\langle+2| \Big)$

↳ $\tilde{\rho}(1) = Tr_2 \hat{\rho} = \langle +2 | \hat{\rho} | +2 \rangle + \langle -2 | \hat{\rho} | -2 \rangle$

$= 1/2 \left(|+1\rangle\langle+1| + |-1\rangle\langle-1| \right)$

$\tilde{\rho}(2) = Tr_1 \hat{\rho} = \langle +1 | \hat{\rho} | +1 \rangle + \langle -1 | \hat{\rho} | -1 \rangle$

$= 1/2 \left(|+2\rangle\langle+2| + |-2\rangle\langle-2| \right)$

notar: estado do sistema de 2 spins = estado puro, mas
estado de apenas 1 spin = mistura estatística!

Ex. 2 : considerar conjunto vetores arbitrários $|\varphi_i(1)\rangle \in \mathcal{E}_1$;
" " " $|\chi_j(2)\rangle \in \mathcal{E}_2$ e

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} c_{ij} |\varphi_i(1)\rangle \otimes |\chi_j(2)\rangle \; : \text{estado do sistema} \qquad (103.1)$$

$\hookrightarrow \hat{\rho} = \sum_{ijke} c_{ij} c_{ke}^{*} \, |\varphi_i(1) \chi_j(2)\rangle \langle \varphi_k(1) \chi_e(2)|$

Lembrar que: $Tr\, |a\rangle\langle b| = \langle b|a\rangle$

$$\hookrightarrow \tilde{\rho}(1) = Tr_2 \hat{\rho} = \sum_{ijke} c_{ij} c_{ke}^{*} \, |\varphi_i(1)\rangle\langle \varphi_k(1)| \, \langle \chi_e(2)|\chi_j(2)\rangle$$

(104.1)

$$\tilde{\rho}(2) = Tr_1 \hat{\rho} = \sum_{ijke} c_{ij} c_{ke}^{*} \, |\chi_j(2)\rangle\langle \chi_e(2)| \, \langle \varphi_k(1)|\varphi_i(1)\rangle$$

· caso particular: vetores $|\varphi_i(1)\rangle$: base ortonormal subespaço $\mathcal{E}_1$

$|\chi_j(2)\rangle$: " " " $\mathcal{E}_2$

$$\hookrightarrow \tilde{\rho}(1) = \sum_{ik} \sum_{j} c_{ij} c_{kj}^{*} \, |\varphi_i(1)\rangle\langle \varphi_k(1)|$$

· hipótese: $c_{ij} = a_i b_j$, i.e., $|\psi\rangle$ não é um estado emaranhado (veja pg. 20.1)

$$\hookrightarrow \tilde{\rho}(1) = \sum_{ik} a_i a_k \underbrace{\sum_j |b_j|^2}_{=1} \, |\varphi_i(1)\rangle\langle \varphi_k(1)|$$

$$= \left(\sum_i a_i |\varphi_i(1)\rangle \right) \left(\sum_k a_k \langle \varphi_k(1)| \right) \equiv |\psi_1\rangle\langle \psi_1| \; : \text{estado puro!}$$

notar:

$\hat{\rho}$: estado puro, não-emaranhado $\longrightarrow$ $\tilde{\rho}(1)$: estado puro : comparar Ex. 1.

· uma medida do emaranhamento em um sistema pode ser determinada via a entropia (103.1);

considerar: sistema completo pode ser dividido em 2 subsistemas A e B : $\mathcal{E} = \mathcal{E}_A \otimes \mathcal{E}_B$

$$\hookrightarrow S_A = - Tr\left(\tilde{\rho}_A \ln \tilde{\rho}_A \right) = - \sum_i \tilde{\rho}_{A,i} \ln \tilde{\rho}_{A,i} \qquad (104.2)$$

onde $\tilde{\rho}_A = Tr_B \hat{\rho}$ e $\tilde{\rho}_{A,i}$: autovalores op. $\tilde{\rho}_A$.

Eq. (104.1) : entropia de emaranhamento.

de modo análogo :

autovalores op. $\tilde{\rho}_B$!

$$S_B = - Tr(\tilde{\rho}_B \ln \tilde{\rho}_B) = - \sum_i \tilde{\rho}_{B,i} \ln \tilde{\rho}_{B,i} \quad ; \quad \tilde{\rho}_B = Tr_A \hat{\rho}$$

novamente :

Ex. 1 : $\hat{\rho} = |\phi\rangle\langle\phi| \rightarrow \tilde{\rho}(i) = 1/2 \left(|+i\rangle\langle+i| + |-i\rangle\langle-i| \right) \; ; \; i = 1,2$

identificando : $\tilde{\rho}(1) = \tilde{\rho}_A$ e $\tilde{\rho}(2) = \tilde{\rho}_B$

$\hookrightarrow S_A = - \sum_{i=1,2} 1/2 \ln 1/2 = \ln 2 = S_B > 0$

como S_A e $S_B > 0 \rightarrow |\phi\rangle$ estado emaranhado

Ex. 2 : considerando hipótese coeficientes $C_{ij} = a_i b_j$

$\hookrightarrow \tilde{\rho}(1) = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| \rightarrow S_A = 0$: estado $|\psi\rangle$ (103.1)

não é emaranhado !