Mecânica Quântica

Revisão Álgebra Linear:

Vetores linearmente independentes: $\sum_i a_i |i\rangle = 0$

$\rightarrow$ aceita apenas solução trivial; $a_i = 0, \forall i$

vetores que não são LI, são LD, Linearmente Dependentes.

Def: Um espaço vetorial tem dimensão n se consegue acomodar no máximo n vetores LI

Def: Um conjunto de n vetores LI forma uma base do espaço vetorial

Teorema: Qualquer vetor n-dimensional pode ser escrito como uma combinação linear (única) de uma base do espaço vetorial

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^{n} v_i |i\rangle$$

Produto Interno: $\vec{v} \cdot \vec{w} \rightarrow \langle v|w\rangle \in \mathbb{C}$ ou $\mathbb{R}$ c/ as propriedades:

- $\langle v|w\rangle = (\langle w|v\rangle)^*$

- $\langle v|v\rangle \geq 0$; 0 se $|v\rangle = 0$

- $\langle v|(a|w\rangle + b|z\rangle) = \langle v|aw + bz\rangle = a\langle v|w\rangle + b\langle v|z\rangle$

- $\langle v|aw\rangle = a\langle v|w\rangle$ onde $a \in$ Corpo
- $\langle av|w\rangle = a^*\langle v|w\rangle \rightarrow$ Antilinear no bra

Def: $\langle v|w\rangle = 0 \iff |v\rangle$ e $|w\rangle$ são $\boxed{\text{ortogonais}}$

Def: $|v|^2 = \langle v|v\rangle \rightarrow \boxed{\text{Norma}}$; $|v\rangle$ é normalizado se $\langle v|v\rangle = 1$

$$|v\rangle = \sum_i v_i |i\rangle$$
$$|w\rangle = \sum_i w_i |i\rangle \rightsquigarrow \langle v|w\rangle = \sum_i \sum_j v_i^* w_j \langle i|j\rangle$$

def: Base ortonormal: base de vetores ortogonais entre si e normalizados.

$$\Rightarrow \langle v|w\rangle = \sum_i \sum_j v_i^* w_j \underbrace{\langle i|j\rangle}_{\delta_{ij}} \rightarrow \sum_i v_i^* w_j$$

$\langle v| \rightarrow$ Adjunto de $|v\rangle \rightarrow$ Vive no Espaço Dual do Espaço Vetorial

$$|v\rangle = \sum_i v_i |i\rangle \rightarrow \langle j|v\rangle = \sum_i v_i \underbrace{\langle j|i\rangle}_{\delta_{ji}} = v_j$$

vetor da base

projeção em um vetor da base por meio de seu dual.

$\rightarrow$ pode ser reescrito como: $|v\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i| v_i$

$a \in$ Corpo , $|v\rangle \in$ Esp. vetorial

$$\begin{cases} |av\rangle = a|v\rangle \\ \langle av| = a^* \langle v| \end{cases}$$

Teorema de Gram - Schmidt $\rightarrow$ Processo de ortonormalização de bases

Transformar uma base qualquer em uma base ortonormal.

Processo: Seja $|I\rangle, |II\rangle, \ldots$ uma base qualquer; normalizamos o primeiro vetor:

$$|1\rangle = \frac{|I\rangle}{\langle I|I\rangle^2} = \frac{|I\rangle}{|I|} \longrightarrow \langle 1|1\rangle = 1$$

Agora p/ o segundo vetor temos:

$$|2'\rangle = |II\rangle - |1\rangle\langle 1|II\rangle$$

$\hookrightarrow$ $|2'\rangle$ é o vetor $|II\rangle$ subtraído de sua projeção sobre o vetor $|1\rangle$.

Note que assim:

$$\langle 1|2'\rangle = \langle 1|II\rangle - \langle 1|1\rangle\langle 1|II\rangle = 0$$

$$|2\rangle = \frac{|2'\rangle}{|2'|}$$ normalização

Para o terceiro vetor teremos:

$$|3'\rangle = |III\rangle - |1\rangle\langle 1|III\rangle - |2\rangle\langle 2|III\rangle$$

$|3'\rangle$ é o vetor $|III\rangle$ a menos de suas projeções em $|1\rangle$ e $|2\rangle$

$$|3\rangle = \frac{|3'\rangle}{|3'|}$$ normalização

E assim sucessivamente.

Teorema: Desigualdade de Schwarz: $|\langle v|w\rangle| \leq |v| \cdot |w|$

Teo: Desigualdade Triangular: $|v+w| \leq |v| + |w|$

Operadores Lineares:

Seja W um esp vetorial sobre um corpo $\mathbb{K}$

Um operador é uma transformação Ω que leva: $\Omega : W \to W$

$$|v\rangle \to |v'\rangle \in W$$

Onde:

$$\Omega|v\rangle = |v'\rangle$$

Propriedades: $\alpha, \beta \in \mathbb{K}$

- $\Omega \alpha |v\rangle = \alpha \Omega |v\rangle$
- $\Omega(\alpha|v_1\rangle + \beta|v_2\rangle) = \alpha\Omega|v_1\rangle + \beta\Omega|v_2\rangle$

- $\langle v|\alpha\Omega = \langle v|\Omega\alpha$
- $(\langle v_1|\alpha + \langle v_2|\beta)\Omega = \langle v_1|\Omega\alpha + \langle v_2|\Omega\beta$

Temos que Ω aje nos vetores de base:

$$\Omega|v\rangle = \Omega\sum_i v_i|i\rangle \rightarrow \sum_i v_i\Omega|i\rangle = \sum_i v_i|i'\rangle$$

O produto de operadores lineares é realizado na sequência de ação

$$\Lambda\Omega|v\rangle = \Lambda(\Omega|v\rangle) = \Lambda|\Omega v\rangle$$

A ordem importa pois nem sempre o comutador é zero:

$$\Omega\Lambda - \Lambda\Omega \equiv [\Omega,\Lambda] \quad \underline{\text{Comutador}}$$

logo, em geral: $\Lambda\Omega|v\rangle \neq \Omega\Lambda|v\rangle$

- $[\Omega,\Lambda\theta] = \Lambda[\Omega,\theta] + [\Omega,\Lambda]\theta$
- $[\Lambda\Omega,\theta] = \Lambda[\Omega,\theta] + [\Lambda,\theta]\Omega$

A inversa do operador é dada por Ω^{-1} onde $\Omega\Omega^{-1} = \Omega^{-1}\Omega = \text{Identidade}$

↳ nem todo operador admiti inversa; $(\Omega\Lambda)^{-1} = \Lambda^{-1}\Omega^{-1}$

Elementos de Matriz de um Operador Linear

Ω possui uma representação matricial, com os elementos referente a alguma base

Seja $\{|e_i\rangle\}$ base inicial

$\{|E_k\rangle\}$ base final

Como $\Omega|e_i\rangle \in V$ pode ser escrito em função da base $\{|E_k\rangle\}$

$$\Omega|e_i\rangle = \sum_k \Omega_{ki}|E_k\rangle$$

Os elementos da matriz Ω_{ki} podem ser calculados usando a ortonormalidade da base.

$$\langle E_m|\Omega|e_i\rangle = \sum_k \Omega_{ki} \underbrace{\langle E_m|E_k\rangle}_{\delta_{mk}}$$

$$\rightarrow \boxed{\langle E_m|\Omega|e_i\rangle = \Omega_{mi}}$$ então.

$v_i = \langle i|v\rangle$

$\Omega|v\rangle = |v'\rangle$ lembrando que

$\rightarrow \quad v_i' = \langle i|v'\rangle \Rightarrow v_i' = \langle i|\Omega v\rangle \; ; \quad |v\rangle = \sum_j v_j|j\rangle$

$\rightarrow \quad v_i' = \langle i|\Omega\Big(\sum_j \underbrace{v_j}_{\text{número}}|j\rangle\Big) \rightarrow \quad v_i' = \sum_j v_j\langle i|\Omega|j\rangle$

$$v_i' = \sum_j v_j \underbrace{\langle i|\Omega|j\rangle}_{\Omega_{ij}}$$

$$\rightarrow \boxed{v_i' = \sum_j \Omega_{ij} v_j}$$

Em matrizes:

$$\begin{bmatrix} v_1' \\ v_2' \\ \vdots \\ v_n' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle 1|\Omega|1\rangle & \langle 1|\Omega|2\rangle & \dots & \langle 1|\Omega|n\rangle \\ \langle 2|\Omega|1\rangle & & & \\ \vdots & & & \\ \langle n|\Omega|1\rangle & \dots & & \langle n|\Omega|n\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix}$$

$$\boxed{T_{ij} = \langle i|T|j\rangle}$$

i-) Operador Identidade: $I_{ij} = \langle i|I|j\rangle = \langle i|j\rangle = \delta_{ij} \rightarrow \mathbb{1}$

ii-) Projetores: Lembrando que podemos escrever um vetor como:

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i|v\rangle$$

$$\Rightarrow |v\rangle = \left(\sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i|\right)|v\rangle \Rightarrow \boxed{\sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i| = \mathbb{1}} \rightarrow \text{Relação de Completude}$$

E identificamos:

$$\mathbb{1} = \sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i| = \sum_i P_i$$

projetores

$$\boxed{P_i = |i\rangle\langle i|}$$

projeta um vetor qualquer na direção de $|i\rangle$

$$P_i|v\rangle = |i\rangle\langle i|v\rangle = |i\rangle v_i$$

$$\langle v|P_i = \langle v|i\rangle\langle i| = v_i^*\langle i|$$

- $$P_i P_j = |i\rangle\underbrace{\langle i|j\rangle}_{\delta_{ij}}\langle j| = \delta_{ij}|i\rangle\langle j| = \delta_{ij}P_j$$

produto externo

Produto de Operadores:

$$(\Omega\Lambda)_{ij} = \langle i|\Omega\Lambda|j\rangle = \langle i|\Omega I\Lambda|j\rangle$$

$$= \sum_k \langle i|\Omega|k\rangle\langle k|\Lambda|j\rangle = \sum_k \Omega_{ik}\Lambda_{kj}$$

$$\Omega|v\rangle = |\Omega v\rangle$$

$$\langle \Omega v| = \langle v|\Omega^{+}$$

Adjunto

$$(\Omega^{+})_{ij} = \Omega^{*}_{ji} \rightarrow \boxed{\Omega^{+} = (\Omega^{t})^{*}}$$

$$(\Omega\Lambda)^{+} = \Lambda^{+}\Omega^{+}$$

Def: Se $\Omega^{+} = \Omega \rightarrow \Omega$ é dito Hermitiano

Def: Se $\Omega^{+} = -\Omega \rightarrow \Omega$ é dito anti-Hermitiano

Def: Dado operador U se $UU^{+} = \mathbb{1}$ dizemos que U é Unitário

note que $U^{-1} = U^{+}$

$\hookrightarrow$ Analogo complexo de rotações tridimensionais (matrizes ortogonais) $\rightarrow RR^{t} = \mathbb{1}$

$\rightarrow$ Matrizes Unitárias preservam o produto interno e consequentemente noções de distância no espaço vetorial. Seja:

$$|v_1'\rangle = U|v_1\rangle$$

$$|v_2'\rangle = U|v_2\rangle$$

$$\langle v_1'|v_2'\rangle = \langle v_1|\underbrace{U^\dagger U}_{\mathbb{1}}|v_2\rangle \rightarrow \langle v_1|\mathbb{1}|v_2\rangle = \underline{\langle v_1|v_2\rangle}$$

Transformação Ativa e Passiva:

Primeiramente Realizar uma transformação unitária em todos os vetores do espaço.

$$|v\rangle \rightarrow U|v\rangle$$

Sobre essa transformação; como se transforma um operador linear qualquer Ω?

$$\langle v'|\Omega|v\rangle = \langle Uv'|\Omega|Uv\rangle = \langle v'|U^\dagger\Omega U|v\rangle$$

↳ transformação ativa

Poderiamos também realizar uma transformação somente dada por:

$$\boxed{\Omega \rightarrow U^\dagger\Omega U}$$

↳ transformação passiva.

Heisenberg & Schroedinger picture

Autovetores/Autovalores: São os vetores que não sofrem uma mudança brusca sobre uma transformação. Mainly: após a transformação apenas são escalados por algum fator (autovalor). Então:

$$\Omega|v\rangle = \omega|v\rangle$$

autovalor (ω), autovetor ($|v\rangle$)

Como determiná-los? $\longrightarrow$ $(\Omega - \omega \mathbb{1})|\omega\rangle = 0$

$\rightsquigarrow$ não zero autovetores

$$\boxed{\det(\Omega - \omega\mathbb{1}) = 0}$$

→ Abrindo chegaremos também ao <u>polinômio/equação característica</u>

$$P^n(\omega) = \sum_{m=0}^{n} C_m \omega^m$$

Autovalores → independe de base.

Podemos ter cada autovalor representando um único autovetor. No entanto; um autovalor pode acabar representando mais de um autovetor

↳ <u>Autovalor degenerado</u>.

<u>Teorema</u>: Autovalores de um operador hermitiano são reais.

<u>prova</u>: $\Omega|\omega\rangle = \omega|\omega\rangle \longrightarrow \langle\omega|\Omega|\omega\rangle = \omega\langle\omega|\omega\rangle$

$$\langle\omega|\Omega^\dagger|\omega\rangle = \omega^*\langle\omega|\omega\rangle \;;\; \Omega^\dagger = \Omega$$

$$\langle\omega|\Omega|\omega\rangle = \omega^*\langle\omega|\omega\rangle$$

$$\omega\langle\omega|\omega\rangle = \omega^*\langle\omega|\omega\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\omega = \omega^*} \rightarrow \underline{\omega \in \mathbb{R}}$$

<u>Teorema:</u> Se Ω é Hermitiana
$\longrightarrow$ Seus autovetores formam uma base ortogonal

Nesse base a Hermitiana é uma matriz diagonal

c/ os autovalores na diagonal

<u>Teorema:</u> Os autovalores de um operador U, unitário possuem módulo 1.

$$|a| = 1 \rightarrow \quad a = e^{i\theta}$$

<u>Teorema:</u> Os autovetores de um operador U, unitário são mutualmente ortogonais.
(assumindo que não haja autovalores degenerados).

<u>Diagonalização de Matrizes Hermitianas:</u>

↳ A matriz Hermitiana assume uma forma diagonal na base dos autovetores.

Então deve-se considerar a matriz unitária U de <u>mudança de base</u>

$$|\omega_i\rangle = U|i\rangle$$

Ω hermitiana, $\exists$ U unitária tal que $U^{\dagger}\Omega U$ é diagonal

<u>Teorema:</u> Se Ω, Λ são operadores hermitianos <u>que comutam</u> então existe pelo menos uma base comum de autovetores que diagonalizam ambos.

↑ vai ser importante p/ princípio da incerteza.

Operador de Propagação:

Quando a descrição da evolução temporal de um sistema se escreve através do estado inicial do sistema multiplicada por uma matriz que dependa do tempo.

propagador

É analogo a encontrar a solução do problema p/ qualquer instante dadas condições iniciais

Ou seja:

$$\boxed{|x(t)\rangle = U(t)\,|x(0)\rangle}$$

$U(t)$ é determinada completamente por meio dos autovetores e autovalores de um operador Ω. Logo; um algoritmo para resolver

$$|\ddot{x}\rangle = \Omega\,|x\rangle \quad \text{seria}$$

i-) Autovalores e Autovetores de Ω

ii-) Construção do propagador U em termos de autovalores e autovetores

iii-) $|x(t)\rangle = U(t)\,|x(0)\rangle$

o mesmo poderá ser feito na eq de Schroedinger: $i\hbar\,|\dot{\psi}\rangle = H\,|\psi\rangle$

$\hookrightarrow |\psi\rangle = U(t)\,|\psi(0)\rangle$

Funções de Operadores:

→ Restrição a funções que podem ser escritas como séries de potências.

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$$

$$\underset{\mathbb{C}}{\underset{\cap}{x}} \to \underset{\text{operador}}{\underset{\downarrow}{\Omega}} \quad \to \quad \underline{f(\Omega) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \Omega^n}$$

$$\underline{e^{\Omega} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Omega^n}{n!}}$$

Entretanto, pensando em Ω hermitiano; na base dos autovetores temos

$$\Omega = \begin{pmatrix} \omega_1 & & & \\ & \omega_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \omega_n \end{pmatrix}$$

$$\downarrow$$

$$e^{\Omega} = \begin{pmatrix} e^{\omega_1} & & & \\ & e^{\omega_2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & e^{\omega_n} \end{pmatrix}$$

Derivadas:

$\Theta(\lambda) \to$ operador que dependa de um parâmetro λ. Então:

$$\frac{d\Theta}{d\lambda} = \lim_{\Delta\lambda \to 0} \left[\frac{\Theta(\lambda + \Delta\lambda) - \Theta(\lambda)}{\Delta\lambda} \right]$$

Um caso especial: $\Theta(\lambda) = e^{\lambda\Omega}$; Ω hermitiano.

$$\frac{d\Theta}{d\lambda} = \Omega e^{\lambda\Omega} = e^{\lambda\Omega}\Omega = \Theta(\lambda)\Omega$$

$$\downarrow$$

EDO $$\frac{d\Theta}{d\lambda} = \Theta(\lambda)\Omega$$

$$\Theta(\lambda) = c\,\exp\left(\int_0^{\lambda}\Omega\, d\lambda'\right) = c\,e^{\Omega\lambda}$$

Entretanto devemos ter cuidado com algumas coisas como por ex:

$$e^{\alpha\Omega}e^{\beta\theta} = e^{\alpha\Omega+\beta\theta}$$

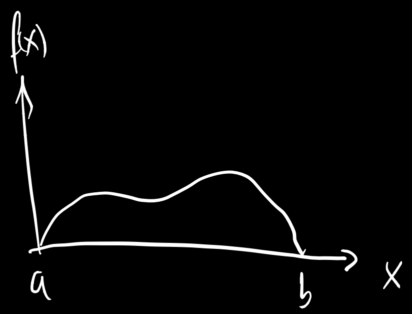
$$e^{\alpha\Omega}e^{\beta\theta}e^{-\alpha\Omega} = e^{\beta\theta}$$

São verdades <u>apenas</u> se $\underline{[\Omega,\theta]=0}$

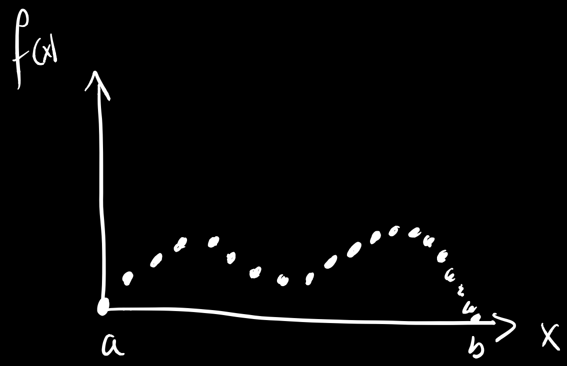
<u>Dimensão Infinita</u>

Aproximação de uma função $f(x)$ $\rightarrow$ num intervalo (a,b) por uma aproximação discreta de n pontos com a função definida em cada ponto e zerando no meio: $\{f_n(x_1), f_n(x_2), \dots f_n(x_n)\}$ e usamos isso como construção das componentes de um vetor ket num espaço vetorial n-dimensional:

$$\{f_n(x_1), f_n(x_2), \dots, f_n(x_n)\} \longrightarrow \quad |f_n\rangle = \begin{bmatrix} f_n(x_1) \\ f_n(x_2) \\ \vdots \\ f_n(x_n) \end{bmatrix}$$



$\xrightarrow{\text{aprox discreta}}$



Uma possível base (pensando também na base canônica) é:

$$|x_i\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} \rightarrow \text{posição } i$$

É possível perceber que $\underline{\langle x_j | x_i \rangle = \delta_{ij}}$ (ortogonalidade)

Obviamente também é válida a relação de completude: $\sum_i^n |x_i\rangle\langle x_i| = \mathbb{1}$

$$\Rightarrow \quad |f_n\rangle = \sum_{i=1}^{n} f_n(x_i)\,|x_i\rangle$$

Fazendo isso p/ cada aproximação discreta; $g_n(x)$, $h_n(x)$, etc e definindo operações de soma e produto usuais, isso forma um <u>espaço vetorial</u>.

Podemos ainda definir o produto interno: $\langle f_n | g_n \rangle = \sum_{i=1}^{n} f_n(x_i)\, g_n(x_i)$

Se $\langle f_n | g_n \rangle = 0$ as funções são ditas ortogonais.

Se fizermos agora $n \to \infty$ adexando todo ponto do intervalo (a,b)

$$f_n(x) = f_\infty(x) \equiv \underline{f(x)} \text{ é a nossa própria função.}$$

Concomitantemente o vetor $|f_n\rangle$ agr possui dimensão infinita. Adição e multiplicação continuam inalteradas. No entanto, haverá diferenças a respeito do produto interno

antes: $$\langle f_n | g_n \rangle = \sum_{i=1}^{n} f_n(x_i)\, g_n(x_i)$$

agora: $$\langle f | g \rangle = \int_a^b f(x)^* g(x)\, dx$$; em especial

$$\langle f | f \rangle = \int_a^b [f(x)]^2 dx$$

Mas e agora os vetores de base? A mesma noção da base de dimensão finita não faz mais sentido agora. Então como elas são construídas? Pensando na ideia de uma base ortogonal ainda faz sentido que o produto interno de bases ortogonais seja nulo; $\langle x' | x \rangle = 0$. Mas e quando $x' = x$?

Pela generalização da relação de completude temos que:

$$\sum_{i=1}^{n} |x_i\rangle\langle x_i| = 1 \longrightarrow \int_a^b |x'\rangle\langle x'|\,dx' = \mathbb{1}$$ se aplicarmos

$\langle x|$ a esquerda e $|f\rangle$ a direita temos:

$$\int_a^b \langle x|x'\rangle\langle x'|f\rangle\,dx' = \langle x|\mathbb{1}|f\rangle \rightarrow \int_a^b \langle x|x'\rangle \underbrace{\langle x'|f\rangle}_{f(x')} dx' = \underbrace{\langle x|f\rangle}_{f(x)}$$

$$\Rightarrow \int_a^b \langle x|x'\rangle f(x')\,dx' = f(x)$$

Seja $\langle x|x'\rangle = \delta(x,x')$ uma função desconhecida.

$$\Rightarrow \int_a^b \delta(x,x') f(x')\,dx' = f(x)$$

; Sabemos que $\delta(x,x')$ some se $x \neq x'$ pela ortogonalidade

Então a integral pode ser rescrita p/ uma região infinitesimal ao redor de $x = x'$:

$$\int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon} \delta(x,x') f(x')\,dx' = f(x)$$

nessa região podemos aproximar $f(x') = f(x)$

$$\Rightarrow \int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon} \delta(x,x') = 1$$ então

$$\delta(x,x') = 0\,, \quad x \neq x'$$

$$\int_a^b \delta(x,x')\,dx' = 1$$

Isso nos lembra da <u>Delta de Dirac</u>:

$$\delta(x-x') = 0 \quad , \quad x \neq x'$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x')\, dx' = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x')\, f(x')\, dx' = f(x)$$

Portanto temos então que a ortonormalização da base é feita por meio da Delta de Dirac:

$$\boxed{\langle x | x' \rangle = \delta(x-x')}$$

Uma propriedade importante é a sua derivada c/ respeito a $\underline{x}$:

$$\delta'(x-x') = \frac{d}{dx}\delta(x-x') = -\frac{d}{dx'}\delta(x-x')$$

$$\int \delta'(x-x')\, f(x')\, dx' = \int \frac{d}{dx}\delta(x-x')\, f(x')\, dx' = \frac{d}{dx}\int \delta(x-x')\, f(x')\, dx' = \frac{df(x)}{dx}$$

Logo:

$$\boxed{\delta'(x-x') = \delta(x-x')\frac{d}{dx}}$$

A derivada não age sobre a Delta.

Sua representação integral é:

$$\boxed{\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ik(x-x')}}$$

Postulados da Mecânica Quântica

1-) Estado do sistema descrito por um vetor $|\psi(t)\rangle$ pertencente a um Espaço de Hilbert

↳ Na mecânica quântica um espaço de Hilbert (físico) é entendido como um espaço que contenha as funções de quadrado integrável

↳ $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx < \infty$, finito; ou seja podem ser normalizadas a 1 e também agrupa as funções que podem ser normalizadas por meio da Delta de Dirac.

2-) Observáveis são descritas por operadores Hermitianos Ω.

↳ Operador de Posição: $\hat{X} = x$

Operador de Momento: $\hat{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

logo: $\Omega = \Omega(\hat{X}, \hat{P})$

3-) Se uma partícula se encontra no estado $|\psi\rangle$ e uma medição é feita relacionado ao operador Ω. A medição obtida será algum autovalor ω do operador Ω. Com isso a função de onda $|\psi\rangle$ irá colapsar para o autovetor associado $|\omega\rangle$. Um autovetor que representa um estado quântico é chamado de autoestado.

$$|\psi\rangle \xrightarrow[\Omega]{\text{medição de}} |\omega\rangle$$

↳ valor medido: ω (autovalor)

"Uma medição sempre faz o sistema pular p/ um autoestado da variável dinâmica sendo medida" - Dirac.

Não é possível saber em qual autoestado $|\psi\rangle$ será colapsada. Apenas temos a probabilidade associada a colapsar em um certo autoestado $|\omega\rangle$ de Ω:

$$\boxed{P(\omega) = \frac{|\langle\omega|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle}}$$

⇝ "tamanho da projeção normalizada"

Notemos que kets ortogonais se mostram como alternativas excludentes

Se $|\psi\rangle$ colapsa em $|\omega_1\rangle$ se medido novamente instantâneamente a probabilidade de colapsar em outro autoestado é nula; de fato: $\langle\omega_1|\omega_2\rangle = 0$ visto que os autovetores de um operador hermitiano formam uma base ortogonal.

4.-) O vetor de estado $|\psi\rangle$ obedece a Equação de Schröedinger:

$$\boxed{i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle}$$

Onde H é o operador Hamiltoneano.

Como saber os possíveis valores de uma medida?

i-) Contrução do Operador Ω

ii-) Autovetores ortonormais $|\omega_i\rangle$ e autovalores ω_i de Ω

iii-) Expansão de $|\psi\rangle$ na base dos autovetores:

$$|\psi\rangle = \sum_i |\omega_i\rangle\langle\omega_i|\psi\rangle$$

$$\langle\omega_j|\psi\rangle = \sum_i \overbrace{\langle\omega_j|\omega_i\rangle}^{\delta_{ji}}\langle\omega_i|\psi\rangle = \langle\omega_j|\psi\rangle$$

$$|\langle\omega_j|\psi\rangle|^2 = \langle\omega_j|\psi\rangle^*\langle\omega_j|\psi\rangle$$

$$\langle\psi\underbrace{|\omega_j\rangle\langle\omega_j|}_{P_{\omega_j}}\psi\rangle = |\psi_j|^2$$

iv-) Probabilidade da medição de um autovalor ω_i:

$$P(\omega_i) = \frac{|\langle\omega_i|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

→ válido apenas para funções quadrado integrável.

per sag

módulo [Componente]

$$\boxed{\langle\psi|P_{\omega_j}|\psi\rangle}$$

↳ Mecânica Quântica não trabalha com predições concretas mas sim com probabilidades.

Podemos ter que o vetor de estado represente a sobreposição de dois estados $|\omega_1\rangle$ e $|\omega_2\rangle$ (normalizados):

$$|\psi\rangle = \frac{\alpha|\omega_1\rangle + \beta|\omega_2\rangle}{(|\alpha|^2+|\beta|^2)^{1/2}}$$ ⤳ p/ efeitos de normalização

tal qual: $$P(\omega_1) = \frac{|\alpha|^2}{|\alpha|^2+|\beta|^2} \; ; \; P(\omega_2) = \frac{|\beta|^2}{|\alpha|^2+|\beta|^2}$$ (prob. são basicamente as projeções de $|\psi\rangle$ em cada autovetor)

↑ Princípio de Superposição (vetorial)

$\boxed{\text{Complicação}}$: Ω é degenerado $\omega_1 = \omega_2 = \omega$. $P(\omega) = ?$

Revisar Autovetores Degenerados

$$P(\omega) = \langle\psi|\mathbb{P}_\omega|\psi\rangle = \langle \mathbb{P}_\omega\psi|\mathbb{P}_\omega\psi\rangle$$; $\mathbb{P}_\omega \to$ projetor

Complicação: Spectro contínuo de autovalores de Ω; na base dos autovetores teriamos:

$$|\psi\rangle = \int |\omega\rangle\langle\omega|\psi\rangle \, d\omega$$

$\boxed{\langle\omega|\psi\rangle \longrightarrow \psi(\omega) \text{ função suave no espaço } \omega}$

Função de Onda no espaço ω

↳ projeção de $|\psi\rangle$ em $|\omega\rangle$

↑ apenas um parâmetro p/ melhor visualização de $|\psi\rangle$

$\psi(\omega) \rightarrow$ Amplitude de Probabilidade de encontrar a partícula com $\Omega = \omega$
↳ talvez de medir?

$$P(\omega) = |\langle\omega|\psi\rangle|^2 \rightarrow \text{densidade de probabilidade}$$

Dada uma medição de Ω; $P(\omega)\,d\omega$ é a probabilidade de se obter um resultado num intervalo $(\omega, \omega + d\omega)$: Logo:

$$\int P(\omega)\,d\omega = \int |\langle\omega|\psi\rangle|^2 d\omega = \int \langle\psi|\omega\rangle\langle\omega|\psi\rangle\,d\omega = \langle\psi|\mathbb{1}|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

É comum adotar que $|\psi\rangle$ seja normalizado.

As coisas ficam um pouco mai complicadas se $\langle\psi|\psi\rangle = \delta(0)$
↳ normalização da Delta

A medida de Ω deixa apenas os autoestados de Ω invariante.

Imagine uma partícula com um autoestado de momento; $|\psi\rangle = |p\rangle$

Se medirmos a posição dessa partícula; ela colapsa para um autoestado de posição $|x\rangle$.

$$|p\rangle = \int |x\rangle\langle x|p\rangle\,dx$$

Em geral temos:

$$|\psi\rangle \xrightarrow[\omega \text{ obtido}]{\Omega \text{ medido}} = \frac{P_\omega|\psi\rangle}{\langle P_\omega\psi|P_\omega\psi\rangle^{1/2}}$$ ← novo estado

O valor Esperado de um operador Ω (média dos possíveis valores) é:

$$\boxed{\langle \Omega \rangle = \langle \psi|\Omega|\psi\rangle}$$

↳ Se a partícula se encontra em um autoestado de Ω: $\Omega|\psi\rangle = \omega|\psi\rangle$

então: $\langle \Omega \rangle = \omega$

Incerteza: Podemos ainda definir o desvio padrão da medida, muitas vezes tomada como incerteza da medida:

$$\Delta\Omega = \langle (\Omega - \langle\Omega\rangle)^2 \rangle^{1/2}$$

ou ainda:

$$(\Delta\Omega)^2 = \sum_i P(\omega_i)(\omega_i - \langle\Omega\rangle)^2$$

ou

$$(\Delta\Omega)^2 = \int P(\omega)(\omega - \langle\Omega\rangle)^2 d\omega$$

$$\Delta\Omega = \left[\langle \psi|(\Omega - \langle\Omega\rangle)^2|\psi\rangle\right]^{1/2}$$

Variáveis Compatíveis e Incompatíveis:

É possível dado um estado $|\psi\rangle$ extrair simultaneamente informação a respeito de dois operadores Ω e Λ? Ou seja resultar em um estado bem definido para certos ω, λ? Qual a probabilidade disso ocorrer?

Em geral a medição de Ω faz $|\psi\rangle$ colapsar p/ $|\omega\rangle$ e logo dps a medição de Λ faz $|\omega\rangle$ colapsar para $|\lambda\rangle$. No entanto é possível o cenário em que o estado produzido pela primeira medição inaltera o segundo. Para isso; teríamos que $|\omega\rangle$ deve ser outro autoestado de Λ.

A medição simultânea é possível então apenas para autoestados simultâneos $|\omega\lambda\rangle$.

$$\Omega|\omega\lambda\rangle = \omega|\omega\lambda\rangle$$
$$\Lambda|\omega\lambda\rangle = \lambda|\omega\lambda\rangle$$

mesmo autovetor p/ 2 operadores MAS com autovalores diferentes

$|\psi\rangle \xrightarrow{\Omega} |\omega\lambda\rangle$ ↳ ω ; Ω, Λ ; $\Omega \to \omega$; $\Lambda \to \lambda$

Quando isso acontece? $\rightarrow$ $[\Omega, \Lambda] = 0$ $\rightarrow$ Operadores Compatíveis

Operadores Incompatíveis: $[\Omega, \Lambda] =$

↳ Operador momento e posição: $[X, P] = i\hbar$

$\Rightarrow \nexists\, |\psi\rangle$ tal que X e P sejam bem definidos

<u>Prob</u>: assumindo primeiramente sem autovalor degenerado.

Para um dado autovalor λ existe apenas um ket e deve ser um autoestado simultâneo: $|\omega\lambda\rangle$. Se Ω é medido primeiro a probabilidade de resultar em ω é: $P(\omega) = |\langle\omega\lambda|\psi\rangle|^2$ após a medição $|\psi\rangle$ colapsa para $|\omega\lambda\rangle$. Com isso a medida de Λ é garantida de ser λ. Logo:

$$\underbrace{P(\omega,\lambda) = |\langle\omega\lambda|\psi\rangle|^2 = P(\lambda,\omega)}$$

<u>para não degenerados</u>

A medida de um operador em relação a outro operador não altera o autovetor primeiramente obtido pois pertencem ao mesmo espaço/ mesma função de onda colapsada

<u>Density Matrix</u>:

Até agora foi retratado "cópias do sistema" ensembles que estavam sempre no mesmo estado $|\psi\rangle$ entretanto; nem sempre isso é válido. O mais comum é um ensemble de N sistemas em estados <u>diferentes</u>; n_i $(i = 1, 2, \ldots, k)$ em um estado $|i\rangle$ (por hipótese uma base ortonormal) Logo temos que o ensemble será descrito por estados $|1\rangle, |2\rangle, \ldots, |k\rangle$ e <u>k occupacy numbers</u> $n_1, \ldots, n_k$. Toda essa informação é guardada

números de ocupação (mec stat) → revisar no que chamamos de matriz de Densidade (que é um operador na realidade)

$$\boxed{\rho = \sum_i p_i |i\rangle\langle i|}$$

Onde $p_i = \frac{n_i}{N}$ -> prob de um sistema aleatório estar no estado $|i\rangle$

Um sistema <u>puro</u> é um sistema tal que todo $p_i = 0$ <u>a menos de um i específico</u>

Um ensemble geral é misturado <u>(mixed)</u>

Calculando o valor esperado de Ω agora teremos:

$$\langle \Omega \rangle = \sum_i p_i \langle i|\Omega|i\rangle$$ note também que:

Traço

$$\mathrm{Tr}(\Omega\rho) = \sum_j \langle j|\Omega\rho|j\rangle$$

$$= \sum_j \sum_i \langle j|\Omega|i\rangle\langle i|j\rangle p_i = \sum_i \sum_j \langle i|j\rangle \langle j|\Omega|i\rangle p_i$$

$$= \sum_i \langle i|\Omega|i\rangle p_i$$

$$= \langle \Omega \rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle \Omega \rangle = \mathrm{Tr}(\Omega \rho)}$$

A probabilidade de obter um certo valor ω será:

$$\boxed{P(\omega) = \mathrm{Tr}(P_\omega \rho)} \qquad P_\omega \to \text{projetor} = |\omega\rangle\langle\omega|$$

Note também as seguintes propriedades:

(i) $\rho^\dagger = \rho$

(ii) $\mathrm{Tr}(\rho) = 1$

(iii) $\rho^2 = \rho$ p/ um ensemble puro

(iv) $\rho = \frac{1}{k} I$ p/ um ensemble uniformemente distribuído entre k estados

(v) $\mathrm{Tr}(\rho^2) \leq 1$ (igualdade no caso de um ensemble puro)

<u>Espaço de Configuração</u>: (base do operador posição)

temos $\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle$; $|x\rangle \to$ base $\left\{\begin{array}{l}\text{normalização} \\ \text{ortogonal}\end{array}\right.$ por Delta.

$$\langle x_1 | x_2 \rangle = \delta(x_1 - x_2) \quad \text{normalização}$$

$$\Rightarrow \mathbb{1} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\rangle\langle x| = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(0)\, dx$$

O operador projetor é dado por:

$$P = \int dx\, |x\rangle\langle x|$$

projeção na base $\hat{X}$

A função de onda $\psi(x)$ de um certo estado $|\psi\rangle$ é definida como:

$$\boxed{\langle x|\psi\rangle = \psi(x)}$$

$\psi(x) \to$ densidade de probabilidade;

prob da partícula estar entre x_1 e x_2: $P = \int_{x_1}^{x_2} dx\, |\psi(x)|^2$

$|\psi\rangle$ pode ser reescrito como:

$$\begin{cases} |\psi\rangle = \int dx\, |x\rangle \underbrace{\langle x|\psi\rangle}_{\psi(x)} \\ |\psi\rangle = \int dx\, \psi(x)\, |x\rangle \end{cases}$$

$\psi(x)$ não passa dos coeficientes de $|\psi\rangle$ na base $|x\rangle$. O mesmo pode ser feito para qualquer base.

Ainda na base das posições um produto interno pode ser computado da seguinte maneira por meio das funções de onda:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int dx \, \langle \psi | x \rangle \langle x | \phi \rangle = \int dx \, \psi^*(x) \cdot \phi(x)$$

Essa mesma generalização continua válida p/ dimensões maiores

<u>Operador de Translação:</u>

Operador T tal que translade todas as posições por uma constante <u>a</u>:

$$\underline{T(a)|x\rangle = |x+a\rangle}$$

Uma função de onda é mudada da seguinte maneira:

$$|\phi\rangle \equiv T(a)|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \phi(x) = \langle x | \phi \rangle = \underline{\langle x | T(a) | \psi \rangle}$$

lembrando que $\langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$

$$\langle x | T(a) | \psi \rangle = \int dx' \langle x | \underbrace{T(a) | x' \rangle}_{\substack{T(a)|x'\rangle \\ \parallel \\ |x'+a\rangle}} \underbrace{\langle x' | \psi \rangle}_{\psi(x')} = \int dx' \langle x | x' + a \rangle \psi(x')$$

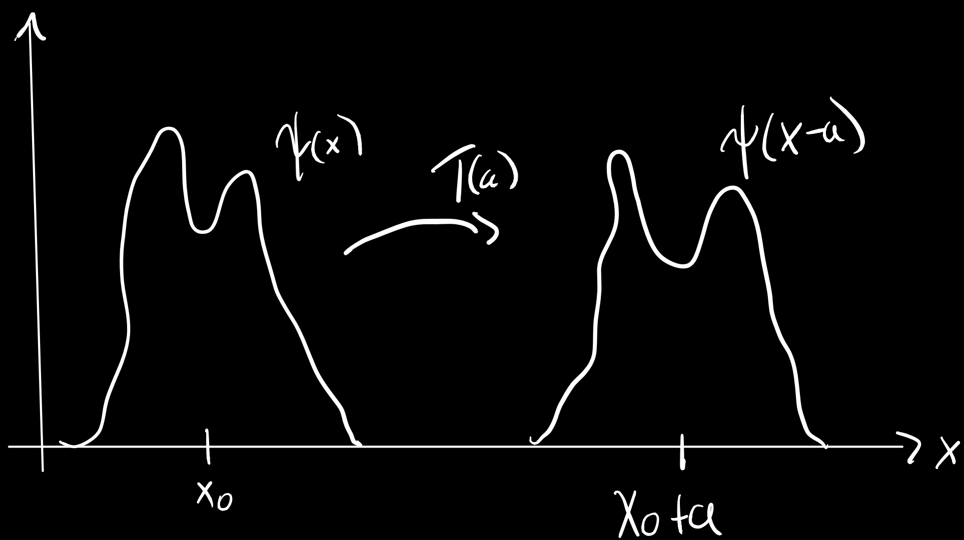
$$\int dx' \, \delta(x - x' - a) \psi(x')$$

fazendo uma mudança de variável $u = x' + a \rightarrow du = dx'$

$$x' = u - a$$

$$\Rightarrow \int du\, \delta(x-u)\, \psi(u-a) = \underline{\psi(x-a)}$$

$$\rightarrow \underline{\phi(x) = \psi(x-a)}$$



Propiedades:

i-) $T(0) = 1$

ii-) $T(a)T(b) = T(a+b) = T(b)T(a)$

iii-) $T(a)^{-1} = T(-a)$

iv-) $T(a)^{-1} = T(a)^{+}$

Unitário (preserva a norma)

Podemos ainda analisar seu gerador (uma transformação infinitesimal)

Taylor expand:

$$T(a) = T(0) + a \frac{dT}{da}(0) + \dots$$

Definimos então o operador $\hat{k}$

$$\hat{k} = i\frac{dT}{da}(0) \quad \text{que é hermitiano.}$$

$$T(a)^{+} = 1 + ia\hat{k}^{+} = T(-a) = 1 + ia\hat{k}$$

$$\Rightarrow \hat{k} = \hat{k}^{+}$$

$$\frac{dT}{da} = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{T(a+\epsilon) - T(a)}{\epsilon} = T(a)\left(\lim_{\epsilon \to 0} \frac{T(\epsilon) - 1}{\epsilon}\right)$$

$$\Rightarrow \frac{dT}{da} = -i\hat{k}\,T(a) \quad (\text{EDO})$$

$$\Rightarrow T(a) = \underbrace{T(0)}_{1} e^{-i\hat{k}a}$$

$$\Rightarrow \boxed{T(a) = e^{-ia\hat{k}}}$$

Analisando agora a ação de $\hat{k}$ sobre um vetor de base $|x\rangle$ temos:

$$\hat{k}|x\rangle = i\frac{dT(a)}{da}|x\rangle\Big|_{a=0} = i\frac{d}{da}|x+a\rangle\Big|_{a=0} = \boxed{i\frac{d}{dx}|x\rangle}$$

no esp. de configuração com $|\phi\rangle = \hat{k}|\psi\rangle$

$$\phi(x) = \langle x|\phi\rangle = \langle x|\hat{k}|\psi\rangle = i\langle x|\frac{dT(a)}{da}|\psi\rangle\Big|_{a=0}$$

$$= \int dx'\, i\langle x|\underbrace{\frac{dT(a)}{da}|x'\rangle}_{\frac{d}{dx'}|x'\rangle}\langle x'|\psi\rangle\Big|_{a=0}$$

$$= \int dx'\, i\langle x|\frac{d}{dx'}x'\rangle\,\psi(x') = \int dx'\, i\frac{d}{dx'}\underbrace{\langle x|x'\rangle}_{\delta(x-x')}\psi(x')$$

derivada de Delta

$$\Rightarrow \int dx'\, i\left[\frac{d}{dx'}\delta(x-x')\right]\psi(x') = \int dx' -i\,\delta(x-x')\,\psi'(x') = -i\psi'(x)$$

$$= -i\frac{d\psi(x)}{dx}$$

muito parecido com $\hat{p}$

Generalização para 3D:

$$\hat{k}_i = i\frac{\partial T(\vec{a})}{\partial a_i}\Big|_{\vec{a}=0} \longrightarrow T(\vec{a}) = e^{-i\vec{a}\cdot\hat{k}}$$

$$\hat{k}_j|\vec{x}\rangle = i\frac{\partial}{\partial x_j}|\vec{x}\rangle$$

Momento

$$\hat{p} \propto \hat{k}$$

$\hat{k} \to$ número de onda

$$\Rightarrow \boxed{\hat{p} = \hbar \hat{k}}$$

(na base $\hat{x}$)

$$T(a) = e^{-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}}$$

$$[x, p] = i\hbar$$

$$\underbrace{\hat{p}\,|\vec{x}\rangle = i\hbar \vec{\nabla} |\vec{x}\rangle}$$

$$\underbrace{\hat{p}\,|x\rangle = i\hbar \frac{d}{dx} |x\rangle}$$

na base $|x\rangle$

Generalização para maiores graus de liberdade:

$$\langle x_1, x_2, \ldots, x_N | x_1', x_2', \ldots, x_N' \rangle = \delta(x_1 - x_1') \ldots \delta(x_N - x_N')$$

$$|\psi\rangle \to \langle x_1, \ldots, x_N | \psi \rangle = \psi(x_1, \ldots, x_N)$$

$$\hat{X}_i |\psi\rangle \to \langle x_1, \ldots, x_N | \hat{X}_i | \psi \rangle = x_i \psi(x_1, \ldots, x_N)$$

$$\hat{P}_i |\psi\rangle \to \langle x_1, \ldots, x_N | \hat{P}_i | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(x_1, \ldots, x_N)$$

Equação de Schröedinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$$

1-) Encontrando a equação: a fim de obter a equação de schröedinger precisa-se apenas realizar a substituição $x \to \hat{x}$ $p \to \hat{p}$ na hamiltoneana clássica do sistema $\mathcal{H}(x,p) \to \hat{H}(\hat{x},\hat{p})$ (quando há uma analogia clássica)

Exemplo: Oscilador Harmônico: $\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$

temos então: $H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$

2-) Solução geral:

i-) H não depende explicitamente do tempo;

$$i\hbar|\dot{\psi}\rangle = H|\psi\rangle$$

$\to$ a partir dos autovetores e autovalores construir o operador de propagação $U(t)$ pois então podemos escrever;

$$|\psi(t)\rangle = U(t)\,|\psi(0)\rangle$$

ou em geral

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

exponencial da hamiltoniana

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

→ nos leva a Eq de Schroedinger independente do tempo.

Autovetores e autovalores de H:

$$\underline{H|E\rangle = E|E\rangle}$$

Expandindo o estado $|\psi\rangle$ na base $|E\rangle$;

$$|\psi\rangle = \sum |E\rangle\langle E|\psi\rangle = \underline{\sum a_E(t)\,|E\rangle}$$

níveis de energia corretos

Onde $\boxed{a_E(t) \equiv \langle E|\psi\rangle}$ → componente de $|\psi\rangle$ na base $|E\rangle$

Agindo em $|\psi\rangle$ com $\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)$ temos:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)|\psi\rangle = \sum \left(i\hbar\dot{a}_E - Ea_E\right)|E\rangle \Rightarrow \underbrace{i\hbar\,\dot{a}_E = Ea_E}_{\text{EDO}}$$

cuja solução é simplesmente

$$\underbrace{a_E(t) = a_E(0)\, e^{-iEt/\hbar}}$$

ou ainda lembrando que

$$a_E = \langle E|\psi\rangle$$

$$\underline{\langle E|\psi\rangle = \langle E|\psi(0)\rangle\, e^{-iEt/\hbar}}$$

então temos:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_E |E\rangle\langle E|\psi(0)\rangle\, e^{-iEt/\hbar}$$

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = \underbrace{\sum_E |E\rangle\langle E|\, e^{-iEt/\hbar}}_{U(t)}\, |\psi(0)\rangle}$$

$e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ exponencial calculado por meio de decomposição espectral de $\hat{H}$

Um outro modo é o seguinte; a partir da eq de Schroedinger.

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle$$

$$\frac{d}{dt}|\psi\rangle = -\frac{i}{\hbar} H|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{|\psi\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}}|\psi(0)\rangle}$$

Thus; $\underline{U(t) = e^{-iHt/\hbar}}$

Note que p/ calcular essa exponencial nos utilizamos do <u>Teorema de Decomposição Espectral</u>. A base dos autovetores de H o diagonaliza; $H = \sum_E |E\rangle\langle E| E = \begin{pmatrix} E_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & E_n \end{pmatrix}$; é sabido que nessa base e^H assume uma forma muito particular:

$$e^H = \sum_E |E\rangle\langle E| e^E \Rightarrow e^{-iHt/\hbar} = \sum_E |E\rangle\langle E| e^{-iEt/\hbar}$$

Note ainda que o operador <u>$U(t)$ é unitário</u> ou seja $UU^\dagger = \mathbb{1}$ e isso preserva a norma dos estados:

$$\langle \psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle \psi(0)|\underbrace{U^\dagger U}_{\mathbb{1}}|\psi(0)\rangle = \langle \psi(0)|\mathbb{1}|\psi(0)\rangle = \underline{\langle \psi(0)|\psi(0)\rangle}$$

Ou seja um significado mais profundo é visto que se o estado $|\psi(t)\rangle$ é normalizado para algum tempo t' específico. Então ele

Continua com a mesma normalização p/ qualquer outro instante t. Ou seja, a normalização independe do tempo quando H não possui dependência explícita do tempo. Ainda há mais uma ideia interessante por trás disso. Lembre-se que no espaço $\mathbb{R}^{2,3}$ os operadores O tais que $O \cdot O^t = \mathbb{1}$ representavam o grupo $SO(2,3)$, ortogonais, que representam rotações. Essa generalização é levada para espaços complexos (como por ex de Hilbert) por meio dos operadores unitários $UU^{\dagger} = \mathbb{1}$ que constituem o grupo $SU(n)$. Como nosso operador de propagação é unitário, podemos interpretá-lo como uma rotação de $|\psi\rangle$ no espaço de Hilbert. Isso é entendido como a "passagem do tempo". A evolução temporal é vista como uma 'rotação'.

Caso 2: operador H depende explicitamente do tempo mas H em diferentes tempos comutam; ou seja: $H = H(t)$

e além disso; $\boxed{[H(t_1), H(t_2)] = 0 \quad \forall\, t_1, t_2}$

Nesse caso o operador de propagação será:

$$\boxed{U(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')\,dt'\right]}$$

?

de onde vem isso?

em específico de onde vem a integral?

Caso 3: $H = H(t)$ mas os diferentes tempos não comutam.

temos então

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

$\boxed{\text{Série de Dyson}}$

Isso nos leva a questões muito mais intrínsecas; seja $\mathcal{U}$ um operador unitário podendo ser o operador de translação T ou evolução temporal U. Como se tratam de operadores unitários; temos que o produto interno é mantido invariante; $\quad |\alpha\rangle \to U|\alpha\rangle$

$$|\beta\rangle \to U|\beta\rangle$$

$$\Rightarrow \langle\beta|\alpha\rangle = \langle\beta|U^\dagger U|\alpha\rangle = \langle\beta|\mathbb{1}|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle$$

Dado um operador Ω podemos inferir agora como $\langle\beta|\Omega|\alpha\rangle$ se transforma:

$$\langle\beta|\Omega|\alpha\rangle \Rightarrow \underline{\left(\langle\beta|U^\dagger\right)\Omega\left(U|\alpha\rangle\right) = \langle\beta|U^\dagger\Omega U|\alpha\rangle}$$

$\Rightarrow$ Essa igualdade devido ao axioma de associetividade é muito importante; é possível imaginar um cenário onde os vetores $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ se transformam com U; ou ainda um cenário onde o operador Ω se transforma e $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ permanecem inalterados. IFC

Representação de Schröedinger: $\quad |\alpha\rangle \longrightarrow U|\alpha\rangle \;;\; \Omega \to \Omega$

Representação de Heisenberg: $\quad |\alpha\rangle \to |\alpha\rangle \;;\; \Omega \to U^\dagger\Omega U$

Podemos definir um observável na representação de Heisenberg temos

$$\boxed{A^H(t) = U^\dagger(t)\, A^S\, U(t)}$$

em $t=0$; $\quad \underline{A^H(0) = A^S}$ obviamente

Onde $U(t) = e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$ $\rightsquigarrow$ supondo que H não depende explicitamente do tempo.

E para os estados temos:

$$|\alpha(t)\rangle_H = |\alpha(0)\rangle_S = |\alpha\rangle_S$$

independente do tempo.

Supondo que A^S não é uma função dependente do tempo, derivando A^H;

$$\frac{d}{dt} A^H = \frac{d}{dt}\left(U^\dagger A^S U\right)$$

$$= \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} A^S U + U^\dagger A^S \frac{\partial U}{\partial t}$$

No entanto temos que p/ um operador de evolução temporal;

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = H\,U(t)$$

Subistituindo isso acima temos:

$$\frac{dA^H}{dt} = -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger H U \underbrace{U^\dagger A^S U}_{A^H} + \frac{1}{i\hbar} \underbrace{U^\dagger A^S U}_{A^H} U^\dagger H U$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger H U A^H + \frac{1}{i\hbar} A^H U^\dagger H U$$

$$\frac{dA^H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A^H, U^\dagger H U]$$

onde podemos definir $\boxed{H^H = U^\dagger H U}$ Hamiltoneano na Representação de Heisenberg

Entretanto no caso em que $U = \exp(iHt/\hbar)$

temos $[U, H] = 0 \Rightarrow \underline{U^\dagger H U = H}$; logo

no entanto nem sempre é verdade.

$$\boxed{\frac{dA^H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A^H, H]}$$

Equação do movimento de Heisenberg

{ evolução temporal de um operador na Representação de Heisenberg

Análogo aos parentes de Poison da mecânica clássica: $\frac{dA}{dt} = [A, H]$

Obs:

autovetor de energia $\to$ estado estacionário; seu valor esperado independe do tempo.

Ex: p/ a partícula livre $H = \dfrac{\hat{P}^2}{2m}$

Seja agora P e X os operadores $\hat{P}$ e $\hat{X}$ na representação de Heisenberg temos então:

$$\frac{d}{dt}P = \frac{1}{i\hbar}[P, H] = 0 \text{ p/ partícula livre}$$

dizemos então que $\hat{P}$ é uma <u>constante de movimento</u> pois $[p, H] = 0$

p/ o operador posição;

$$\frac{d}{dt}X = \frac{1}{i\hbar}[X, H] = \frac{1}{i\hbar}\left[X, \frac{\hat{P}^2}{2m}\right]$$

$$\Rightarrow \frac{1}{i\hbar 2m}[X, P^2] = \frac{1}{i\hbar 2m}\left([\hat{X}, \hat{P}]\hat{P} + \hat{P}\underbrace{[\hat{X}, \hat{P}]}_{i\hbar}\right) = \frac{1}{\cancel{i\hbar 2}m} \cdot \cancel{2i\hbar}\hat{P} = \frac{\hat{P}}{m}$$

entretanto $\hat{P}$ é uma constante de movimento logo $\hat{P}(t) = P(0) \ \forall t$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\hat{X} = \frac{P(0)}{m} \Rightarrow \hat{X}(t) = \hat{X}(0) + \left(\frac{P(0)}{m}\right)t$$

Note então agora o comutador $[\hat{x}(t), \hat{x}(0)]$;

$$[\hat{x}(t), \hat{x}(0)] = \left[\hat{x}(0) + \frac{\hat{p}(0)t}{m}, \hat{x}(0)\right] = \cancelto{0}{[\hat{x}(0), \hat{x}(0)]} + \left[\frac{\hat{p}(0)t}{m}, \hat{x}(0)\right]$$

$$= \frac{t}{m}\underbrace{[\hat{p}(0), \hat{x}(0)]}_{-i\hbar} \rightarrow [\hat{x}(t), \hat{x}(0)] = -\frac{i\hbar t}{m}$$

Essa noção | $\rightarrow$ Heisenberg Picture x Schroedinger Picture

Limite Clássico:

questão primordial qual a taxa de variação de um valor esperado $\langle \Omega \rangle$ com relação a um estado $|\psi\rangle$? Vamos supor que o operador Ω não possua dependência explicita do tempo;

$$\langle \Omega \rangle = \langle \psi | \Omega | \psi \rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle \Omega \rangle = \frac{d}{dt}\langle \psi | \Omega | \psi \rangle$$

$$= \langle \dot{\psi} | \Omega | \psi \rangle + \langle \psi | \Omega | \dot{\psi} \rangle$$

No entanto da eq de schroedinger temos:

$$|\dot{\psi}\rangle = \frac{-i}{\hbar} H |\psi\rangle$$ e tirando a adjunto;

$$\langle \dot{\psi} | = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | H$$

Então:

$$\frac{d}{dt}\langle\Omega\rangle = \langle\dot{\psi}|\Omega|\psi\rangle + \langle\psi|\Omega|\dot{\psi}\rangle$$

$$= +\frac{i}{\hbar}\langle\psi|H\Omega|\psi\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\psi|\Omega H|\psi\rangle$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\Big[\langle\psi|\Omega H|\psi\rangle - \langle\psi|H\Omega|\psi\rangle\Big]$$

$$\stackrel{!}{=} -\frac{i}{\hbar}\langle\psi|[\Omega,H]|\psi\rangle$$; de fato:

$$= \langle\psi|\big[\Omega H - H\Omega|\psi\rangle\big]$$

$$\langle\psi|\big[\Omega H|\psi\rangle - H\Omega|\psi\rangle\big]$$

$$= \langle\psi|\Omega H|\psi\rangle - \langle\psi|H\Omega|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\langle\Omega\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle\psi|[\Omega,H]|\psi\rangle$$

valor esperado do comutador! referente a $|\psi\rangle$

ou seja; $\langle\psi|[\Omega,H]|\psi\rangle = \langle[\Omega,H]\rangle$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d}{dt}\langle\Omega\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle[\Omega,H]\rangle}$$

Evolução Temporal do Valor esperado de um Operador

Teorema de Ehrenfest's

$\leadsto$ muito parecido c/ o caso da mecânica clássica; $\frac{d\omega}{dt} = \{\omega, \mathcal{H}\}$ parentese de Poison

Ex: Tomemos agora $\Omega = \hat{X}$; então:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle[\hat{x},H]\rangle$$

Tomando a hamiltoneana genérica de uma partícula teremos:

$$H = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

$$\Rightarrow [\hat{X},H] = \left[\hat{X}, \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{x})\right] = \left[\hat{X}, \frac{\hat{P}^2}{2m}\right] + \underbrace{[\hat{x}, V(\hat{x})]}_{=0}$$

$$\left[\hat{X}, \frac{\hat{P}^2}{2m}\right] = \frac{1}{2m}[\hat{X}, \hat{P}\cdot\hat{P}] = \frac{1}{2m}\left([\hat{X},\hat{P}]\hat{P} + \hat{P}[\hat{X},\hat{P}]\right)$$

lembrando que $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

$$\Rightarrow \frac{1}{2m}\left(i\hbar\hat{p} + \hat{p}i\hbar\right) = \frac{1}{2m} 2i\hbar\hat{p} = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}\langle x\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle[\hat{x}, \hat{p}^2/2m]\rangle$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\left\langle\frac{i\hbar}{m}\hat{p}\right\rangle = \frac{\cancel{-i}}{\cancel{\hbar}}\cdot\frac{\cancel{i\hbar}}{m}\langle\hat{p}\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{1}{m}\langle\hat{p}\rangle}$$

$\hookrightarrow$ relação $\dot{x} = p/m$ da mecânica clássica