

UNIVERSIDADE FEDERAL DO TOCANTINS
CAMPUS UNIVERSITÁRIO DE ARAGUAÍNA
CURSO DE LICENCIATURA EM FÍSICA

Alex Kevyn dos Anjos Carreiro

UMA INTRODUÇÃO AO FORMALISMO
DA MECÂNICA QUÂNTICA

Araguaína-TO
2017

Alex Kevyn dos Anjos Carreiro

UMA INTRODUÇÃO AO FORMALISMO
DA MECÂNICA QUÂNTICA

Monografia apresentada à Universidade Federal do Tocantins, como requisito parcial de avaliação na disciplina de Trabalho de Conclusão de Curso de Licenciatura em Física.

Orientador: Prof. Dr. Nilo Mauricio Sotomayor Ch.

Aprovado em: 11/10/2017

Membros da Banca Examinadora

Prof. Dr. Nilo Mauricio Sotomayor Ch.
Orientador

Prof. Dra. Liliana Yolanda Ancalla Dávila
Examinador

Prof. Dra. Regina Lelis de Sousa
Examinador

Araguaína-TO
2017

Sumário

Introdução	8
1 Conceitos introdutórios	10
1.1 A Mecânica Quântica	10
1.2 Formulações da Mecânica Quântica	11
1.2.1 Mecânica Matricial	11
1.2.2 Mecânica Ondulatória	11
1.2.3 Mecânica Quântica de Dirac	11
1.3 O princípio de incerteza	11
1.4 O desvio padrão	12
1.4.1 Princípio de incerteza para um pacote de onda gaussiano	13
1.5 Princípio de correspondência	18
1.6 Exemplo	19
1.6.1 O oscilador harmônico quântico	19
2 Fundamentos da Mecânica Quântica	20
2.1 Estado clássico de um sistema físico	20
2.1.1 Mecânica Newtoniana	20
2.1.2 Mecânica de Hamilton	21
2.2 Estado quântico de um sistema	22
2.3 Os postulados da Mecânica Quântica	23
2.3.1 Postulado 1	23
2.3.2 Postulado 2	23
2.3.3 Postulado 3	23
2.3.4 Postulado 4	23

2.3.5	Postulado 5	24
2.3.6	Postulado 6	24
2.4	O formalismo da mecânica quântica	24
2.4.1	O espaço de Hilbert	24
2.4.2	O espaço dos kets	25
2.4.3	Espaço dual	27
2.4.4	O espaço dos bra	27
2.4.5	Operações entre brackets	28
2.4.6	Expansão de um ket	29
2.5	Transformações Lineares e Operadores	30
2.5.1	Transformações lineares	30
2.5.2	Operadores lineares	31
3	Representação matricial de estados e operadores	34
3.1	Autoestados e autovalores de um operador	34
3.2	Operações adjuntas	35
3.3	Operador auto-adjunto ou hermitiano	35
3.3.1	Expansão de kets nos autoestados de operadores hermitianos	39
3.4	Representação matricial de operadores	40
3.4.1	Representação matricial de um operador hermitiano	41
3.5	Representação matricial das transformações lineares	42
3.5.1	No espaço dos ket-vectors	42
3.5.2	No espaço dos bra-vectors	44
3.5.3	Representação matricial do produto interno	45
3.5.4	Representação matricial do produto externo	45
4	Medições e Observáveis	47
4.1	Observáveis	47
4.2	Medições	47
4.2.1	Valor de expectação	49
4.3	Espaços de posição e momento	51
4.3.1	Observáveis com espectro contínuo	51

4.4	Funções de onda nos espaços de posição e momento	52
4.4.1	Autoestados do operador posição	52
4.4.2	Valor de expectação usando funções de onda	55
4.5	Representação do operador momento na base dos estados de posição	56
4.5.1	Operador translação	56
4.6	Função de onda no espaço de momento	57
4.6.1	Relação entre as representações de posição e momento	58
4.6.2	Pacote de onda Gaussiano	60
5	Dinâmica Quântica	62
5.1	Evolução temporal	62
5.2	Operador de evolução temporal	62
5.2.1	Operador de evolução temporal infinitesimal	63
5.3	A equação de Schrödinger	64
5.4	Teorema de Ehrenfest	66
5.4.1	Observáveis conservados	67
5.4.2	Hamiltoniano independente do tempo	67
5.5	Estados estacionários e a base da energia	68
5.6	Relação entre as Mecânicas Matricial e Ondulatória	72
5.6.1	A equação de movimento de Heisenberg	74
5.6.2	Quadro quântico e clássico	76
5.6.3	Relações de comutação canônica	76
	Considerações finais	78

Lista de Figuras

1.1	<i>gráfico da distribuição normal onde cada faixa possui uma largura de um desvio padrão [2].</i>	13
1.2	Pacote de onda $f(x, t = 0)$ com perfil gaussiano em $t = 0$	14
1.3	<i>Densidades de probabilidade $f(x, t = 0) ^2$ e $g(k, t = 0) ^2$ para $\sigma = 0.01$. Quando maior a precisão em Δx, maior a indeterminação em Δk . .</i>	17

Resumo

Este trabalho de conclusão de curso tem como objetivo fazer uma revisão bibliográfica da disciplina de Mecânica Quântica buscando entender melhor os formalismos apresentado por essa nova ciência. Para elaborá-lo, buscaram-se algumas referências antigas e atuais, tendo o trabalho se fundamentado nos livros escritos por Eisberg e Resnick, Leonard Susskind e ART Friedman, J. J. Sakurai, David J. Griffiths, P. A. M. Dirac e em alguns sites da internet. Esta revisão bibliográfica apresentará o formalismo da mecânica quântica onde serão abordados os conceitos tais como princípio de incerteza, superposição de estados, dualidade onda-partícula, distribuição de probabilidade e não localidade da partícula, o espaço de Hilbert, transformações lineares e operadores e dinâmica quântica. Com a análise dessas referências nota-se o quão é importante o estudo desses formalismos para a compreensão dos conceitos da mecânica quântica.

Palavras chave: Formalismo da Mecânica Quântica.

Abstract

This work of conclusion of course had as objective to make a bibliographical revision of the discipline of Quantum Mechanics in order to better understand the formalisms presented by this new science. In order to elaborate it, some references were looked for older and others current, the work being based on the books written by Eisberg and Resnick, Leonard Susskind and ART Friedman, JJ Sakurai, David J. Griffiths, Pam Dirac and in some sites of the Internet. This literature review will present the formalism of quantum mechanics, where concepts such as uncertainty principle, superposition of states, wave-particle duality, probability distribution and nonparticle locality, Hilbert space, linear transformations and operators, and dynamics quantum theory. With the analysis of these references it is noted how important is the study of these formalisms for the understanding of the concepts of quantum mechanics.

Keywords: Quantum Mechanics formalism.

Introdução

O estudo da mecânica quântica teve grandes avanços no século *XX*, e se mostrou uma disciplina que tem sua teoria difícil de ser compreendida e pouca ligação com o mundo clássico, porém provocou uma grande revolução nas ideias da Física clássica, trazendo uma visão incomum da realidade, onde os conhecimentos acumulados de quântica eram enigmáticos.

A mecânica quântica está presente em várias disciplinas, tais como química, ciências da saúde, as engenharias e no estudo da nanotecnologia. Esses exemplos demonstram a importância em um aprofundamento e de se dar uma atenção a mais para essa nova ciência.

Para o desenvolvimento do presente trabalho foi realizada uma revisão bibliográfica do formalismo da mecânica quântica. Ao estudar os conceitos da disciplina tive muitas dificuldades em compreender os conceitos de superposição de estados, princípio de incerteza, dualidade onda-partícula, distribuição de probabilidade e não localidade da partícula, porque esses conteúdos fogem do raciocínio lógico, e se mostram muito distante da lógica da mecânica clássica, pois os fenômenos que ocorrem nas dimensões atômicas $\approx (10^{-10} \text{ m})$ e subatômicas ($10^{-10} \text{ m} <$) não criam condições para uma melhor interpretação no mundo macroscópico.

Por isso é muito importante antes de se aprofundar no estudo da mecânica quântica aprender os formalismos propostos por Paul A. Dirac, E. J. R. A. Schrödinger e W. Heisenberg, entre outros. Os autores usam da ferramenta matemática para propor as teorias da mecânica quântica. Sem o entendimento dos conceitos apresentados por esses físicos, torna-se difícil a aprendizagem da Física quântica.

Este trabalho apresentará o formalismo da mecânica quântica propostos por Paul Dirac, E. Schrödinger e W. Heisenberg. O trabalho é dividido em cinco capítulos: no

primeiro capítulo serão brevemente detalhados conceitos introdutórios tais como mecânica matricial, mecânica ondulatória, mecânica Quântica de Dirac, o princípio de incerteza e o princípio de correspondência. No segundo capítulo serão abordados os postulados e fundamentos matemáticos da mecânica quântica, iniciando com explicações sobre o estado clássico de uma sistema, em seguida apresentando a definição de estado Quântico e os principais postulados da Mecânica Quântica. Em relação ao formalismo serão abordados: o espaço de Hilbert, o espaço dos kets, o espaço dos bra e transformações e operadores lineares. No terceiro capítulo abordará a representação matricial de estados e operadores quânticos, explicando os autoestados, autovalores, e expansão de kets. O capítulo quatro definirá os conceitos de medições e observáveis e finalmente, o capítulo cinco se explicará a dinâmica quântica, a evolução temporal, o teorema de Ehrenfest os estados estacionário e a base dos estados de energia. Mostra-se também a relação entre as Mecânicas Matricial e Ondulatória.

Capítulo 1

Conceitos introdutórios

1.1 A Mecânica Quântica

A mecânica quântica juntamente com a teoria quântica de campos são duas formulações fundamentais da Física que tratam dos fenômenos que ocorrem na natureza na escala de dimensões de tamanho da ordem de átomos e partículas subatômicas.

A Física Clássica pode ser derivada a partir da Mecânica Quântica como uma aproximação válida apenas em escalas macroscópicas. Na Mecânica Quântica grandezas tais como energia, momento linear, momento angular, e outras podem assumir apenas valores discretos, e os objetos possuem simultaneamente características ondulatórias e corpusculares, existindo limites para a precisão com a qual essas grandezas podem ser conhecidas.

Os fundamentos da Mecânica Quântica foram estabelecidos no decorrer da primeira metade do século XX por Max Planck, Niels Bohr, Werner Heisenberg, Louis de Broglie, Arthur Compton, Albert Einstein, Erwin Schrödinger, Max Born, John von Neumann, Paul Dirac, Enrico Fermi, Wolfgang Pauli, Max von Laue, Freeman Dyson, David Hilbert, Wilhelm Wien, Satyendra Nath Bose, Arnold Sommerfeld, e outros.

1.2 Formulações da Mecânica Quântica

1.2.1 Mecânica Matricial

A Mecânica Quântica Matricial foi a primeira formulação consistente da Mecânica Quântica. Foi criada por Werner Heisenberg ¹ (Nobel em Física 1932), Max Born ² (Nobel em Física 1954), e Ernst Pascual Jordan ³ em 1925. Esta fundamentação interpreta as propriedades físicas **observáveis** das partículas como matrizes que evoluem no tempo.

1.2.2 Mecânica Ondulatória

A Mecânica Quântica Ondulatória é uma formulação da Mecânica Quântica devida a Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger ⁴ criada em 1926 (Nobel em Física 1933). A formulação tem base em uma equação diferencial parcial que descreve como o **estado** quântico de um sistema físico evolui no tempo.

1.2.3 Mecânica Quântica de Dirac

A formulação matemática rigorosa da Mecânica Quântica é devida a Paul Adrien Maurice Dirac (Nobel em Física 1933), David Hilbert (matemático alemão), John von Neumann (físico e matemático húngaro), e Hermann Klaus Hugo Weyl (físico e matemático alemão). Esta teoria unifica as duas formulações anteriores, inclui a generalização relativística da teoria e a abstração moderna de movimento no espaço de Hilbert.

1.3 O princípio de incerteza

O princípio de incerteza, formulado pela primeira vez por Werner Karl Heisenberg em 1927 e estabelece, por meio de várias inequações matemáticas, um limite fundamental de precisão com o qual determinados pares de propriedades físicas de uma partícula (variáveis complementares), tais como posição e momento, podem ser conhecidas.

¹Físico alemão. 5 de dezembro de 1901, 1 de fevereiro de 1976.

²Físico alemão. 11 Dezembro 1882, 5 Janeiro 1970

³Físico alemão. 18 Outubro 1902, 31 Julho 1980

⁴Físico austríaco. 12 de agosto de 1887, 4 de janeiro de 1961

A equação que relaciona o desvio padrão da posição Δx e o desvio padrão do momento Δp_x foi derivado por Earle Hesse Kennard em finais de 1927 e por Hermann Weyl em 1928 [1].

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

onde \hbar é a constante $(h/2\pi)$ reduzida de Planck e

$$\sigma_x = \Delta x = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2}$$

$$\sigma_p = \Delta p_x = \sqrt{\langle \hat{p}_x^2 \rangle - \langle \hat{p}_x \rangle^2}$$

são os desvios padrão da posição e do momento respectivamente. As definições estarão abaixo.

1.4 O desvio padrão

é uma medida que quantifica a dispersão de um conjunto de valores de uma grandeza. Um desvio padrão pequeno indica que os dados estão espalhados próximos do valor médio ou valor de expectativa. Um desvio padrão grande indica que os dados estão dispersos sobre um amplo intervalo de valores. É representada na figura 1.1

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx$$

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 f(x) dx$$

$$\sigma_x = \Delta x = \left[\int_{-\infty}^{\infty} x^2 f(x) dx - \left(\int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

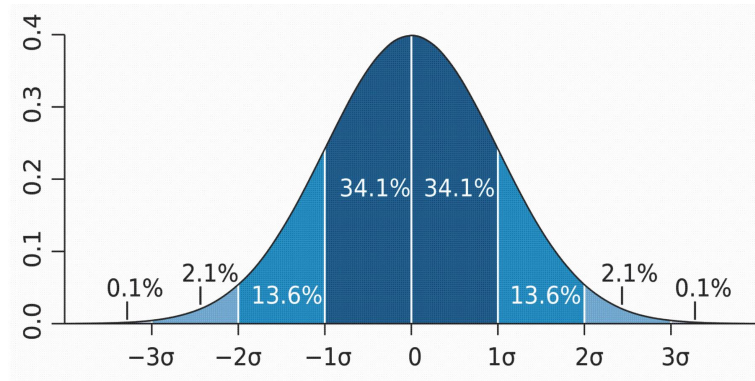


Figura 1.1: gráfico da distribuição normal onde cada faixa possui uma largura de um desvio padrão [2].

1.4.1 Princípio de incerteza para um pacote de onda gaussiano

Considere-se a função densidade de probabilidade gaussiana ou distribuição normal

$$f(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}}$$

Onde $\langle x \rangle = \mu$ é o valor de expectação, $(\Delta x)^2 = \langle (x - \mu)^2 \rangle = \sigma^2$ é a variância, e $\Delta x = \sigma$ é o desvio padrão. Um pacote de onda $\Psi(x, t) \equiv f(x, t)$ que descreve uma certa partícula quântica possui uma amplitude modulada por uma função Normal ou gaussiana. Em um instante particular de tempo $f(x, t = 0)$ a função

$$f(x, t = 0) = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{(x - \mu)^2}{4\sigma^2}} e^{-i k_0 x}.$$

é representada na figura 1.2

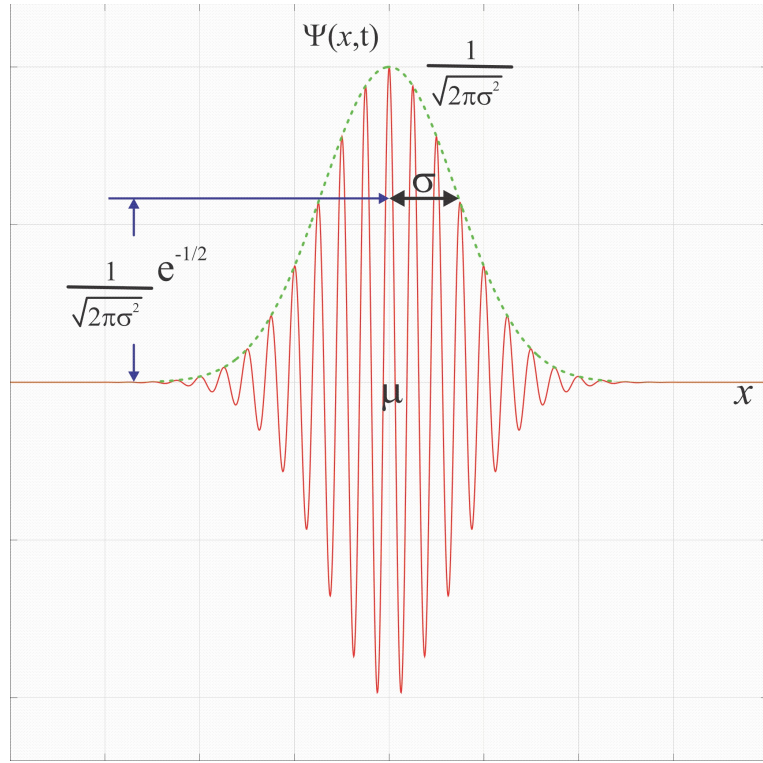


Figura 1.2: Pacote de onda $f(x, t = 0)$ com perfil gaussiano em $t = 0$.

Considerando o valor esperado de x como sendo $\mu = 0$ e desconsiderando a fase arbitrária, calcula-se a transformada inversa de Fourier para obter a função de onda correspondente $g(k)$ no espaço k ,

$$f(x, t = 0) = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}.$$

$$g(k, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} e^{-ikx} dx.$$

$$g(k, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right]^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} e^{-ikx} dx.$$

Completando quadrados segue,

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right]^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4\sigma^2}(x+ik4\sigma^2/2)^2} e^{-\sigma^2 k^2} dx.$$

Pode-se mostrar que,

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-k^2\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4\sigma^2}x^2} dx.$$

O resultado da integral é,

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

de forma que

$$g(k, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-\sigma^2 k^2} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{1}{4\sigma^2}}}$$

$$g(k, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right]^{\frac{1}{2}} (4\pi\sigma^2)^{\frac{1}{2}} e^{-\sigma^2 k^2}$$

$$g(k, t = 0) = \left(\frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\sigma^2 k^2} e^{-i k x_0}.$$

Observa-se que as duas funções são gaussianas,

$$f(x, t = 0) = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}},$$

$$g(k, t = 0) = \left(\frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\sigma^2 k^2}.$$

com $\langle \hat{x} \rangle = 0$

$$\Delta x = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle}$$

então

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \int f^*(x) x^2 f(x) dx = \int x^2 |f(x)|^2 dx$$

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int x^2 e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\sigma}\right)^2} dx$$

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{\pi}(2\sigma^2)^{\frac{3}{2}}}{2}$$

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \sigma^2$$

de forma que,

$$\Delta x = \sqrt{\sigma^2} = \sigma$$

No espaço k , $\langle k \rangle = 0$, de forma que

$$\Delta k = \sqrt{\langle \hat{k}^2 \rangle}$$

$$\langle \hat{k}^2 \rangle = \int g^*(k) k^2 f(k) dk = \int k^2 |g(k)|^2 dk$$

$$\langle \hat{k}^2 \rangle = \frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}} \int k^2 e^{-2\sigma^2 k^2} dk = \frac{1}{4\sigma^2}$$

Usando a integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^2 e^{-au^2} du = \frac{\sqrt{\pi}}{2a^{\frac{3}{2}}}$$

$$\langle \hat{k}^2 \rangle = \frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{\pi}}{2(2\sigma^2)^{\frac{3}{2}}}$$

$$\langle \hat{k}^2 \rangle = \frac{1}{4\sigma^2}$$

Assim,

$$\Delta k = \sqrt{\frac{1}{4\sigma^2}} = \frac{1}{2\sigma}$$

Segundo o princípio de incerteza $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$. assim para a função de onda gaussiana temos

$$\Delta x \Delta k \geq \sigma \frac{1}{2\sigma}$$

$$\Delta x \Delta(\hbar k) \geq \frac{\hbar}{2}$$

de forma que, para o pacote de onda gaussiano,

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Temos então duas funções com as seguintes densidades de probabilidade,

$$|f(x, t = 0)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}.$$

$$|g(k, t = 0)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}(\frac{1}{2\sigma})} e^{-2(\frac{k}{2\sigma})^2}.$$

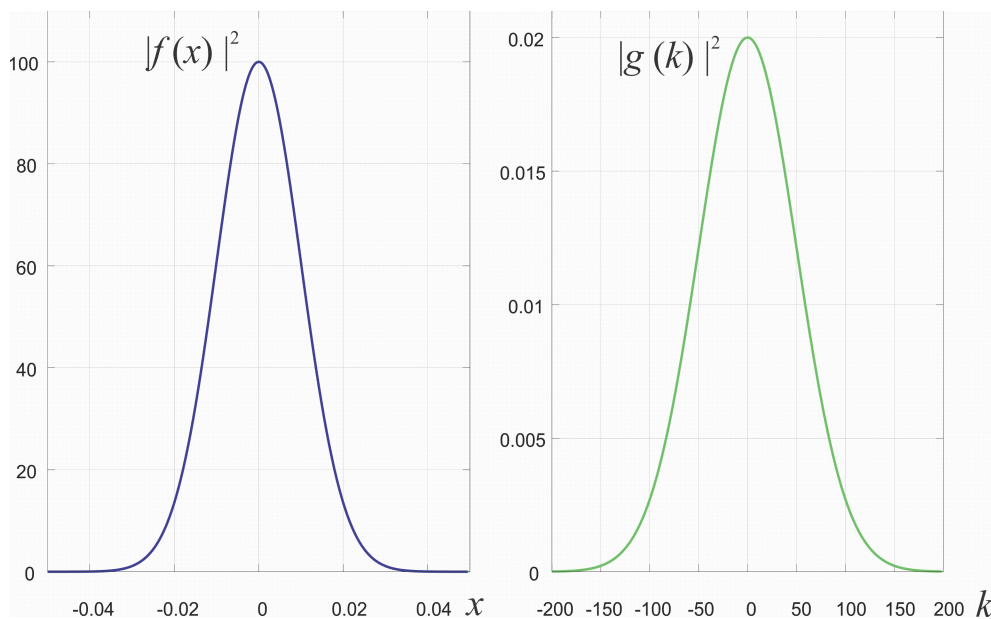


Figura 1.3: Densidades de probabilidade $|f(x, t = 0)|^2$ e $|g(k, t = 0)|^2$ para $\sigma = 0.01$. Quando maior a precisão em Δx , maior a indeterminação em Δk

$f(x)$ representa uma partícula que está localizada aproximadamente no intervalo de largura da distribuição, observa-se uma dependência inversa de $f(x)$ e $g(k)$ em σ , isto significa que se a distribuição da posição é estreita $\Delta x \rightarrow 0$ então, a distribuição do número de onda é larga e $\Delta p_x \rightarrow \infty$ e vice versa. Esse comportamento oposto das larguras das distribuições é também verdadeiro para outros pares de funções não gaussianas. Se uma função é estreita (larga), logo sua função reversa de Fourier é larga (estreita). Uma interpretação física do princípio de incerteza é a seguinte. Se é necessário medir a posição da partícula pode-se empregar fótons para iluminar as partículas e observar aqueles que foram espalhados em determinada direção. Fótons carregam momento de forma que eles transferem parte desse momento às partículas quando elas colidem. Portanto, haverá uma incerteza no valor do momento das partículas. Mais ainda, se for necessário refinar a medição da posição será necessário empregar ondas eletromagnéticas de menor comprimento de onda, devido a que é impossível resolver a posição de uma partícula a uma precisão menor que a ordem de grandeza do comprimento de onda da luz que está sendo empregada. Logo, se deseja-se diminuir Δx é necessário diminuir o comprimento de onda, o que significa incrementar a frequência (já que $\nu = c/\lambda$), e assim incrementar o momento dos fótons ($p = h\nu/c$). Isto certamente incrementará a dispersão do momento Δp . Assim um valor pequeno de Δx , implica um valor grande de Δp consistente com o Princípio de incerteza. O Princípio de incerteza estabelece que independentemente da precisão do experimento para medir a posição ou o momento das partículas não será possível diminuir o valor limite $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$. Este princípio de incerteza não é um resultado que depende da precisão do experimento. Ao invés, é uma consequência matemática da natureza ondulatória da matéria relacionada com a análise de Fourier.

1.5 Princípio de correspondência

O princípio de correspondência, formulado inicialmente por Niels Henrik David Bohr ⁵ em 1920 estabelece que o comportamento dos sistemas descritos pela física quântica reproduz a física clássica no limite de números quânticos grandes. Isto é, para grandes órbitas e grandes energias o cálculos quânticos devem concordar com os cálculos clássicos [3].

⁵Físico dinamarquês. 7 October 1885, 18 November 1962

1.6 Exemplo

1.6.1 O oscilador harmônico quântico

Segundo a mecânica quântica, a energia total de um oscilador harmônico quântico unidimensional é formado por um conjunto discreto de valores,

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

com $n = 0, 1, 2, \dots$, \hbar a constante reduzida de Planck, e ω a frequência angular do oscilador. Para um oscilador harmônico clássico (por exemplo o sistema massa-mola unidimensional),

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2$$

Da comparação das duas equações,

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2$$

Colocando em evidência n ,

$$n = \frac{m\omega A^2}{2\hbar} - \frac{1}{2}$$

Se considerarmos valores típicos de um oscilador na escala humana $m = 1$ kg, $\omega = 1$ rad/s, e $A = 1$ m, logo $n \approx 4.74 \times 10^{33}$. Esse é um número extremamente grande de forma que o sistema está verdadeiramente no limite do princípio de correspondência. No mundo macroscópico apenas percebemos um contínuo de energias para o sistema por que a diferença entre níveis de energia é da ordem de $\hbar\omega \approx 1.05 \times 10^{-34}$ J, muito abaixo do que qualquer microscópio possa resolver. Dizemos então que estamos no limite clássico.

Capítulo 2

Fundamentos da Mecânica Quântica

2.1 Estado clássico de um sistema físico

O conhecimento das coordenadas generalizadas de um sistema em um instante de tempo dado permite a determinação da localização, orientação e movimento do sistema, nesse instante. A localização, orientação e movimento do sistema em um dado instante de tempo especificam completamente o **estado do sistema** em esse instante.

2.1.1 Mecânica Newtoniana

Na mecânica de Newtoniana, a Segunda Lei de Newton relaciona o estado de um sistema físico com a força total que atua sobre o sistema.

$$\sum_i \vec{F}_i(\vec{r}, t) = m\vec{a}$$

$$\vec{F}_R(\vec{r}, t) = m \frac{d\vec{v}}{dt}$$

$$\vec{F}_R(\vec{r}, t) = m \frac{d^2\vec{r}}{dt^2}$$

A resolução da equação diferencial fornece o estado do sistema em qualquer tempo, uma vez conhecido o estado inicial. A teoria é preditiva e as suas previsões podem ser testadas por subsequentes observações do estado do sistema. A equação da segunda lei de Newton

incorpora todos os conceitos fundamentais que são usados para a descrição de qualquer sistema físico:

- O estado do sistema é descrito por um objeto matemático,
- A dinâmica está codificada em uma equação diferencial (equação de movimento).

O estado de uma partícula pontual é especificado pela sua posição $\vec{r}(t) = [x(t), y(t), z(t)]$ e pela sua velocidade $\dot{\vec{r}}(t) = [\dot{x}(t), \dot{y}(t), \dot{z}(t)]$ como funções do tempo. $\vec{r}(t)$ é um vetor e gera uma trajetória em um espaço n-dimensional.

A dependência temporal de posição da partícula é obtida pela resolução da equação 2.1. A solução de uma equação diferencial de segunda ordem é completamente determinada uma vez que conhecemos o valor de sua função e de sua primeira derivada no tempo inicial t_0 .

Por exemplo para uma partícula pontual de massa m que experimenta uma força constante \vec{F} :

$$\vec{r}(t) = \frac{1}{2} \frac{F}{m} (t - t_0)^2 + \dot{\vec{r}}(t_0)(t - t_0) + \vec{r}(t_0) \quad (2.1)$$

Dada a posição e a velocidade do sistema em um instante dado t_0 , a trajetória completa pode ser determinada pela equação 2.1. Em conclusão, o estado físico de um sistema clássico é completamente determinado pelo conhecimento da sua posição e velocidade em um tempo dado ($\vec{r}, \dot{\vec{r}} = \dot{\gamma}$).

2.1.2 Mecânica de Hamilton

No formalismo da mecânica de Hamilton uma variável dinâmica geral que representa uma grandeza física é uma função $A(q, p)$ no espaço de fases $\Gamma(q_1, q_2, \dots, q_n; p_1, p_2, \dots, p_n)$ de dimensão $2n$. O Hamiltoniano $H(q, p)$ determina a dinâmica através das equações canônicas de movimento

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = q_i, H$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = p_i, H$$

Com A, B como sendo o colchete de Poisson de A com B

$$[A, B] = \sum \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right).$$

Neste contexto, um estado puro é representado por um simples ponto $(q_1, q_2, \dots, q_n, p_1, p_2, \dots, p_n)$ $(\vec{q}_0, \vec{p}_0) \in \Gamma$. Cada variável dinâmica A , como posição ou momento, possui em esse estado um valor numérico definido $A(q_0, p_0)$ sem incerteza ou dispersão. Postula-se que, em princípio, todas as variáveis dinâmicas associadas com o sistema podem ser medidas com precisão infinita.

2.2 Estado quântico de um sistema

Na física quântica a situação é diferente devido ao papel fundamental desenvolvido pelo processo de medição. Quando uma variável dinâmica é medida o estado que descreve o sistema é modificado de uma forma imprevisível e, de acordo com o princípio de incerteza, isto coloca um limite para a precisão com a qual as variáveis dinâmicas complementares podem ser medidas de forma simultânea.

Descarta-se então a noção de que todas as variáveis dinâmicas do sistema possuem valores bem definidos em cada instante de tempo, ao invés disto, a Mecânica Quântica apenas pode prever o número de vezes n que um resultado particular será obtido quando um número grande N de sistemas físicos independentes identicamente preparados (ensemble estatístico) é submetido a um processo de medição. Em outros termos, a mecânica quântica prediz a frequência estatística n/N ou probabilidade de um evento. Na mecânica Quântica, o estado de um sistema é especificado por um vetor $|\alpha\rangle$ definido em um espaço vetorial complexo, de dimensão finita ou infinita, denominado espaço de Hilbert, \mathbb{H} . As variáveis dinâmicas \mathcal{A} que representam grandezas observáveis são representadas por operadores hermitianos \hat{A} que atuam sobre o espaço de Hilbert, \mathbb{H} . Postula-se que cada vetor $|\alpha\rangle \in \mathbb{H}$ não nulo é normalizado e determina um estado quântico puro com toda a informação que precisa ser conhecida sobre o sistema. Estados quânticos podem ser puros, mistos, e emaranhados ¹.

¹Specify

2.3 Os postulados da Mecânica Quântica

A mecânica quântica é uma teoria axiomática por que está fundamentada em poucos princípios ou postulados.

2.3.1 Postulado 1

É possível em determinadas circunstâncias, associar um **Vetor** a um **Estado Quântico** de um sistema físico ou ensemble. Este **Vetor de Estado**, $|\alpha\rangle$, contém toda a informação que pode ser conhecida sobre o sistema em questão, Ele está definido em um espaço de Hilbert complexo \mathbb{H} de dimensão finita ou infinita e pode ser multiplicado por um número complexo arbitrário sem alterar o seu significado físico.

2.3.2 Postulado 2

Os estados dinâmicos de um sistema quântico podem se combinar em acordo com o princípio de superposição.

2.3.3 Postulado 3

A cada variável dinâmica \mathcal{A} é associado um operador linear \hat{A} . A cada **observável** de um sistema físico é associado um operador auto-adjunto ou hermitiano permitindo um conjunto completo de autofunções.

2.3.4 Postulado 4

O único resultado de uma medição precisa de uma variável dinâmica \mathcal{A} é um dos autovalores a_n do operador linear \hat{A} associado com \mathcal{A} .

2.3.5 Postulado 5

Se uma série de medições da variável dinâmica \mathcal{A} é realizada sobre um ensemble de sistemas descritos pelo vetor de estado $|\Psi\rangle$, o valor de espectação ou valor mais provável desta variável dinâmica é:

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

2.3.6 Postulado 6

Um vetor que representa qualquer estado quântico $|\alpha\rangle$ de um sistema, pode ser expresso como uma combinação linear dos autovetores de \hat{A} , onde \hat{A} é o operador associado com a variável dinâmica \mathcal{A} .

2.4 O formalismo da mecânica quântica

2.4.1 O espaço de Hilbert

O espaço de Hilbert \mathcal{H} é um espaço vetorial de produto interno complexo. O produto interno $\langle \beta | \alpha \rangle$ é uma estrutura adicional que associa a cada par de vetores $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ de \mathcal{H} , uma quantidade escalar complexa $\mathbb{C} = \langle \beta | \alpha \rangle$ denominada produto escalar dos vetores. O espaço de Hilbert é um espaço métrico completo em relação à distância definida pela norma do produto interno. Segundo o postulado 1, é possível, em determinadas circunstâncias, associar um elemento de um espaço de Hilbert ou **vetor** a um **Estado Quântico** de um sistema físico ou ensemble.

Definição

O espaço de Hilbert é um espaço vetorial \mathcal{H} sobre o corpo \mathbb{C} dos números complexos, junto com o mapeamento

$\langle \cdot | \cdot \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$, e as seguintes propriedades:

$$1. \langle \alpha | \beta \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^*, \forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}; \quad (2.2)$$

$$2. \langle ax_1 + bx_2 | y \rangle = a \langle x_1 | y \rangle + b \langle x_2 | y \rangle, \forall a, b \in \mathbb{C}; \quad (2.3)$$

$$3. \langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0. \quad (2.4)$$

A norma é uma função real definida por

$$\| |\alpha\rangle \| = \sqrt{\langle \beta | \alpha \rangle}, \quad (2.5)$$

e a distância entre dois pontos localizados por $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ em \mathcal{H} é definida em termos da norma por

$$d(\alpha, \beta) = \| |\alpha\rangle - |\beta\rangle \| = \sqrt{\langle \alpha - \beta | \alpha - \beta \rangle}. \quad (2.6)$$

2.4.2 O espaço dos kets

Considere-se um espaço vetorial complexo \mathcal{H} cuja dimensionalidade é especificada em acordo à natureza do sistema físico em estudo. O espaço vetorial em questão é conhecido como Espaço de Hilbert em homenagem a David Hilbert, matemático alemão que estudou os espaços vetoriais em dimensões infinitas. Na mecânica quântica um estado físico é representado por um **vetor de estado** em um espaço de Hilbert. Segundo Paul Dirac, denomina-se a esse vetor de **ket** e denotamos por $|\alpha\rangle$. Postula-se que este ket contém a informação completa sobre o estado físico do sistema em estudo. Um ket $|\alpha\rangle$ é um elemento do conjunto $\{|\alpha^{(i)}\rangle\} \equiv \mathcal{H}$.

O conceito de espaço de Hilbert é uma generalização do conceito de espaço euclidiano. Esta generalização permite que noções e técnicas algébricas e geométricas aplicáveis a espaços de dimensão dois e três se estendam a espaços de dimensão arbitrária, incluindo espaços de dimensão infinita.

Propriedades dos kets

1. Dois kets podem ser somados,

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle. \quad (2.7)$$

A soma $|\gamma\rangle$ é um outro ket, com $|\gamma\rangle \in \mathcal{H}$

2. O produto de um ket $|\alpha\rangle$ por um número complexo c ,

$$c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c, \quad (2.8)$$

é um outro ket.

3. Associatividade da adição. Dados $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle \in \mathcal{H}$,

$$|\alpha\rangle + (|\beta\rangle + |\gamma\rangle) = (|\alpha\rangle + |\beta\rangle) + |\gamma\rangle,$$

4. Comutatividade da adição. Dados $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}$

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle, \quad (2.9)$$

5. Ket nulo. $\exists |0\rangle \in \mathcal{H}$ tal que,

$$|\alpha\rangle + |0\rangle = |0\rangle + |\alpha\rangle = |\alpha\rangle, \quad (2.10)$$

6. vetor inverso. $\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H} \exists -|\alpha\rangle$ tal que,

$$|\alpha\rangle - (|\alpha\rangle) = |0\rangle, \quad (2.11)$$

7. Produto escalar distributivo. Dados $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}$, e $c \in \mathbb{C}$

$$c(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = c|\beta\rangle + c|\alpha\rangle, \quad (2.12)$$

8. Produto escalar comutativo. Dados $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ e $c, d \in \mathbb{C}$

$$c(d|\alpha\rangle) = (cd)|\alpha\rangle. \quad (2.13)$$

Um dos postulados físicos estabelece que $|\alpha\rangle$ e $c|\alpha\rangle$, com $c \neq 0$, representam o mesmo estado físico, isto é apenas a direção é significativa nos espaços vetoriais.

2.4.3 Espaço dual

Funcional linear

Um **funcional linear** (co-vector) f é um mapeamento linear de um espaço vetorial V para o campo ou corpo dos escalares \mathbb{C} isto é $f: V \rightarrow \mathbb{C}$.

Por exemplo no espaço vetorial n -dimensional \mathcal{R}^n , se vetores são representados como matrizes coluna, logo os funcionais lineares são representados como matrizes linha e a sua ação sobre os vetores é dada pelo produto interno, ou produto matricial com vetor linha pela esquerda e o vetor coluna pela direita. Em geral, se V é um espaço vetorial sobre o campo \mathbb{C} , logo um funcional linear f é uma função de V para \mathbb{C} que é linear, com as propriedades

$$f(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = f|\alpha\rangle + f|\beta\rangle \quad \forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in V \quad f(a|\alpha\rangle) = af|\alpha\rangle \quad \forall |\alpha\rangle \in V, a \in \mathbb{C}. \quad (2.14)$$

definição

O conjunto de todos os **funcional lineares**, f , do espaço de Hilbert \mathcal{H} para \mathbb{C} forma um **espaço vetorial** sobre \mathbb{C} juntamente com as operações de adição e multiplicação por um escalar. Este espaço chamado **espaço dual** de \mathcal{H} e é denotado por \mathcal{H}^* . Em outros termos, dado um espaço vetorial \mathcal{H} sobre o campo ou corpo \mathbb{C} , o **espaço dual** \mathcal{H}^* é definido como o conjunto de todos os **funcionais lineares** $f: \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$. O mesmo espaço dual \mathcal{H}^* torna-se um espaço vetorial sobre \mathbb{C} quando preservadas a adição e multiplicação por um escalar. se \mathcal{H} é dimensionalmente finito, logo \mathcal{H}^* possui a mesma dimensão de \mathcal{H} .

2.4.4 O espaço dos bra

O espaço \mathcal{H}^* , dual do espaço de Hilbert \mathcal{H} , é formado pelo conjunto de elementos denominados **bra-vectors** ou simplesmente **bra** e denotados por $\langle\beta|$. Dizemos que $\langle\beta|$ é o adjunto de $|\beta\rangle$ e corresponde ao complexo conjugado da matriz associada ao estado. Esta operação é agora indicada pelo símbolo \dagger . Assim,

$$\langle\beta| = |\beta\rangle^\dagger. \quad (2.15)$$

Postula-se que para cada ket $|\beta\rangle$ existe um bra, denotado por $\langle\beta|$ neste espaço dual.

Para uma combinação linear

$$[c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle]^\dagger = c_1^*\langle\alpha| + c_2^*\langle\beta| \quad (2.16)$$

2.4.5 Operações entre brackets

Produto interno

Define-se o produto interno de um bra e um ket por

$$(\langle\beta|).(|\alpha\rangle) = \langle\beta|\alpha\rangle, \quad (2.17)$$

sendo o resultado, em geral, um número complexo. O produto interno de bras e kets possui duas propriedades fundamentais

- $\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$
- $\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0$.

Ortogonalidade dos kets

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

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle = 0 \quad (2.18)$$

Norma de um ket

Dado um ket $|\alpha\rangle$ não é nulo, é possível normalizar este ket de forma que o ket normalizado $|\tilde{\alpha}\rangle$ é:

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}}|\alpha\rangle,$$

com a propriedade que,

$$\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\alpha}\rangle = 1.$$

Geralmente $\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}$ é denominada a norma de $|\alpha\rangle$.

Produto externo

O produto externo de um ket $|\beta\rangle$ por um bra $\langle\alpha|$ é definido por

$$(|\beta\rangle) \times (\langle\alpha|) = |\beta\rangle\langle\alpha|$$

Este produto possui as características de um operador. Considere-se o produto externo $|\beta\rangle\langle\alpha|$ de um bra e um ket, atuando sobre um estado $|\alpha\rangle$

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

$|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle$ é a **projeção vetorial** ou a **componente vetorial** de $|\alpha\rangle$ na direção de $|a'\rangle$. Observa-se que $|a'\rangle\langle a'|$ seleciona a porção do ket $|\alpha\rangle$ paralela a $|a'\rangle$, de forma que $|a'\rangle\langle a'|$ é conhecido como o **operador projeção** ao longo da base de estados $|a'\rangle$ e é denotado por $\Lambda_{a'}$:

$$\Lambda_{a'} \equiv |a'\rangle\langle a'|.$$

$c_{a'} = \langle a'|\alpha\rangle$ é a **projeção escalar** de $|\alpha\rangle$ sobre $|a'\rangle$, isto será mostrado posteriormente ao estudar a decomposição de um ket em função dos autoestados de um operador.

2.4.6 Expansão de um ket

Seja $\{|a'\rangle\} = (|a^{(1)}\rangle, |a^{(2)}\rangle, \dots, |a^{(N)}\rangle)$ uma base de kets no espaço de Hilbert N -dimensional \mathcal{H} . Um estado arbitrário $|\alpha\rangle$ deste espaço pode ser expresso como uma combinação linear dos vetores base,

$$|\alpha\rangle = c_{a^{(1)}}|a^{(1)}\rangle + c_{a^{(2)}}|a^{(2)}\rangle + \dots + c_{a^{(N)}}|a^{(N)}\rangle,$$

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

onde os $c_{a'}$ são constantes complexas e representam as componentes do ket.

Norma quadrática de um ket

A **norma quadrática** ou **comprimento quadrático** de um estado arbitrário $|\alpha\rangle$ expandido em uma base de autoestados de \mathcal{H} é definida por

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \left(\sum_{a''}^N c_{a''}^* \langle a''|\right) \left(\sum_{a'}^N c_{a'} |a'\rangle\right)$$

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

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

Se os kets base são ortonormais $\langle a''|a'\rangle = \delta_{a''a'}$,

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \sum_{a''}^N \sum_{a'}^N c_{a''}^* c_{a'} \delta_{a''a'}$$

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

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

Que é uma quantidade positiva. A norma do vetor é portanto,

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

2.5 Transformações Lineares e Operadores

2.5.1 Transformações lineares

Uma **transformação linear** \hat{T} é um mapeamento que atribui a cada estado físico $|\alpha\rangle$ de um espaço vetorial V um outro vetor $\hat{T}|\alpha\rangle = |\beta\rangle$ que pertence a outro espaço vetorial V' . É portanto, uma transformação entre dois espaços vetoriais $\hat{T} : V \rightarrow V'$, com $\dim V =$

$\dim V' = N < \infty$, sobre o mesmo **campo** dos escalares \mathbb{C} (ou **corpo** dos números complexos) que preserva as operações de adição e multiplicação por um escalar².

2.5.2 Operadores lineares

Um **operador** \hat{A} é uma transformação linear que atribui a cada elemento $|\gamma\rangle$ de um espaço vetorial V um outro vetor que pertence ao mesmo espaço vetorial V , isto é $\hat{A} : V \rightarrow V$. Se \hat{A} é o operador associado com a transformação linear indicada e $|\gamma\rangle$ é um estado arbitrário de \mathcal{H} , então a ação do operador sobre o ket é denotada pela equação

$$\hat{A} |\gamma\rangle = |\delta\rangle$$

onde $|\delta\rangle \in V$. Em acordo com o postulado 3, na Mecânica Quântica, a cada variável dinâmica \mathcal{A} e é associado a um operador linear \hat{A} .

Propriedades dos operadores

Os operadores que consideraremos são lineares no sentido em que são preservadas a adição vetorial e a multiplicação por um escalar,

$$\hat{X}(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1\hat{X}|\alpha\rangle + c_2\hat{X}|\beta\rangle,$$

$$\hat{X}(c|\alpha\rangle) = c\hat{X}(|\alpha\rangle) = c\hat{X}|\alpha\rangle$$

Um operador atua sobre um ket pela esquerda,

$$\hat{B}(|\beta\rangle) = \hat{B}|\beta\rangle$$

O produto resultante é um outro ket.

Dois operadores \hat{A} e \hat{B} são iguais $\hat{A} = \hat{B}$ se,

$$\hat{A}|\alpha\rangle = \hat{B}|\alpha\rangle.$$

²Anel comutativo.

\hat{A} é o operador nulo se, para qualquer ket arbitrário $|\alpha\rangle$

$$\hat{A}|\alpha\rangle = |0\rangle.$$

Operadores podem ser somados; as operações de adição são associativas e comutativas:

$$\hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A}$$

$$\hat{A} + (\hat{B} + \hat{C}) = (\hat{A} + \hat{B}) + \hat{C}.$$

Operadores \hat{A} e \hat{B} podem ser multiplicados, sendo que as operações de multiplicação entre operadores é em geral não comutativa. Assim,

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}.$$

A multiplicação de operadores é associativa,

$$\hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C} = \hat{A}\hat{B}\hat{C}$$

Um operador \hat{A} atua sobre um bra $\langle\alpha|$ do lado direito,

$$(\langle\alpha|)\hat{A} = \langle\alpha|\hat{A}. \quad (2.19)$$

O resultado é outro bra. O ket $\hat{A}|\alpha\rangle$ e o bra $\langle\alpha|\hat{A}$, em geral, não são o dual do outro.

Define-se o símbolo \dagger para indicar que

$$\hat{A}|\alpha\rangle \leftrightarrow \langle\alpha|\hat{A}^\dagger.$$

O operador \hat{A}^\dagger é denominado o **operador adjunto** do operador \hat{A} ³.

Se a ação de um operador \hat{A} sobre $|\alpha\rangle$ é seguida pela ação do operador \hat{B} o resultado será,

$$\hat{B}\hat{A}|\alpha\rangle = \hat{B}|\beta\rangle = |\gamma\rangle$$

Se as ações dos operadores \hat{A} e \hat{B} sobre o estado $|\alpha\rangle$ ocorrem na ordem contrária, o

³Generalização da transposta conjugada de matrizes quadradas.

resultado será outro estado. Em geral, $\hat{A}\hat{B}|\alpha\rangle$ é diferente de $\hat{B}\hat{A}|\alpha\rangle$. Isto é expresso por uma combinação especial de produtos denominada **comutador** de \hat{A} e \hat{B} .

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

que é um operador não nulo.

Para cada operador \hat{A} existe um operador inverso denotado por \hat{A}^{-1} os quais definem o **operador unitário** quando combinados,

$$\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{I}$$

O inverso do operador unitário é ele próprio. [4]

Capítulo 3

Representação matricial de estados e operadores

3.1 Autoestados e autovalores de um operador

Se \hat{A} é uma transformação linear de um espaço vetorial \mathcal{H} , sobre o campo dos números complexos \mathcal{C} , nele mesmo $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ e $|\alpha\rangle \neq |0\rangle$ é um estado que pertence a \mathcal{H} , logo $|\alpha\rangle$ é um autoestado de \hat{A} se $\hat{A}|\alpha\rangle$ é um múltiplo escalar de $|\alpha\rangle$. Esta condição pode ser escrita pela equação:

$$\hat{A}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad (3.1)$$

então, $|\alpha\rangle$ é denominado **autoestado** (eigenstate) do operador \hat{A} e α é um escalar (número complexo), denominado **autovalor** associado com o autovetor $|\alpha\rangle$. Assim, um autoestado de um operador, definido em um espaço vetorial, é um vetor não nulo cuja direção não muda quando a transformação linear é aplicada sobre ele. Se o espaço vetorial \mathcal{H} é dimensionalmente finito, logo a transformação linear pode ser representada por uma matriz quadrada e o vetor por um vetor coluna.

3.2 Operações adjuntas

Inicialmente temos identificado ao vetor bra $\langle\alpha|$ como o dual ou **adjunto** do ket vetor $|\alpha\rangle$

¹. É possível então introduzir o **operador adjunto**. Seja

$$|\beta\rangle = a |\alpha\rangle,$$

onde a é um número complexo.

O vetor bra adjunto é então

$$\langle\beta| = a^* \langle\alpha|$$

$$\langle\beta| = \langle\alpha| a^*$$

devido a que a é apenas um escalar.

Se agora temos o vetor de estado,

$$|\beta\rangle = \hat{A} |\alpha\rangle,$$

onde \hat{A} é um operador, resulta natural definir o **operador adjunto** \hat{A}^\dagger tomando o adjunto de $|\beta\rangle$, isto é

$$\langle\beta| = \langle\alpha| \hat{A}^\dagger,$$

onde \hat{A}^\dagger atua pela esquerda.

Também,

$$(a \hat{A})^\dagger = a^* \hat{A}^\dagger$$

3.3 Operador auto-adjunto ou hermitiano

Um **operador** linear \hat{A} , em um espaço de Hilbert, é dito **auto-adjunto** ou **hermitiano** se ele é igual ao seu próprio operador adjunto \hat{A}^\dagger , isto é

¹definido apenas em relação ao produto interno de vetores de estado.

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$$

Se o espaço de Hilbert é dimensionalmente finito e uma base ortonormal pode ser escolhida, logo o operador \hat{A} é auto-adjunto se, e somente se, a matriz que descreve \hat{A} em relação a esta base é Hermitiana, isto é, é igual a sua transposta conjugada. Matrizes hermitianas são também denominadas auto-adjuntas.

Teorema

Todos os autovalores de um operador hermitiano são reais [5].

Prova

Partindo da equação de autovalores para um operador hermitiano

$$\hat{A}|a'\rangle = a'|a'\rangle \quad (3.2)$$

Tomando o conjugado hermitiano de ambos os membros

$$\langle a'|\hat{A}^\dagger = a'^*\langle a'|$$

Usando a condição de que $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ e multiplicando por $|a'\rangle$,

$$\langle a'|\hat{A}|a'\rangle = a'^*\langle a'|a'\rangle = a'\langle a'|a'\rangle$$

Como $\langle a'|a'\rangle \neq 0$ segue que

$$a'^* = a'$$

Teorema

Todos os autoestados ou autofunções de um operador hermitiano correspondentes a autovalores distintos são ortogonais.

Prova

Partindo da equação 3.2, e tomando o conjugado hermitiano de ambos os membros da equação,

$$\langle a' | \hat{A}^\dagger = a'^* \langle a' |$$

Usando a condição de que $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ e $a'^* = a'$,

$$\langle a' | \hat{A} = a' \langle a' |$$

Multiplicando por $|a''\rangle$ pela direita

$$\langle a' | \hat{A} | a'' \rangle = a' \langle a' | a'' \rangle = a'' \langle a' | a'' \rangle$$

Isto pode ser escrito da forma,

$$(a' - a'') \langle a' | a'' \rangle = 0$$

Se $a' \neq a''$ então,

$$\langle a' | a'' \rangle = 0$$

Se os autovalores a_n e a_m que pertencem a autoestados diferentes são iguais, logo eles são denominados **degenerados**. Assim, os autoestados não são mais ortogonais mas tomando combinações lineares desses estados degenerados é possível construir um conjunto ortogonal de vetores.

Teorema espectral para operadores auto-adjuntos

Seja $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ um operador hermitiano ou auto-adjunto e \mathcal{H} um espaço vetorial complexo ou real de dimensão n . Então, existe uma base ortonormal de \mathcal{H} denotada por $\{a'\} = a^{(1)}, a^{(2)}, \dots, a^{(n)}$ formada pelos autovetores de \hat{A} .

Se existem outros operadores hermitianos definidos no mesmo espaço de Hilbert, logo os seus autovetores também formam um conjunto completo e podem ser usados como vetores

base no mesmo espaço de Hilbert.

Quando um vetor $|\alpha\rangle$ é simultaneamente um autovetor de dois operadores \hat{A} e \hat{B} , estes operadores devem comutar entre eles. Isto pode ser demonstrado da forma seguinte:

$$\hat{A}|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle \quad (3.3)$$

$$\hat{B}|\alpha\rangle = b|\alpha\rangle \quad (3.4)$$

Operando \hat{A} sobre 3.4 temos

$$\hat{A}\hat{B}|\alpha\rangle = b\hat{A}|\alpha\rangle = ab|\alpha\rangle \quad (3.5)$$

De forma semelhante, operando \hat{B} sobre 3.4 temos

$$\hat{B}\hat{A}|\alpha\rangle = a\hat{B}|\alpha\rangle = ab|\alpha\rangle \quad (3.6)$$

Subtraindo 3.6 de 3.5 obtem-se

$$\hat{A}\hat{B}|\alpha\rangle - \hat{B}\hat{A}|\alpha\rangle = 0$$

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\alpha\rangle = 0$$

Isto é satisfeito por todos os autoestados $|\alpha\rangle$ quando,

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

A formulação reversa possui um grande uso prático:

Quando dois operadores \hat{A} e \hat{B} comutam entre eles $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, é possível encontrar autoestados $|\alpha\rangle$ que são simultaneamente autoestados de ambos os operadores.

3.3.1 Expansão de kets nos autoestados de operadores hermitianos

Segundo o teorema espectral para operadores auto-adjuntos todos os autovetores ou autoestados de um operador hermitiano podem ser usados para formar um conjunto completo de vetores base ortonormais no correspondente espaço de Hilbert. Dado um ket arbitrário $|\alpha\rangle$ no espaço dos kets gerado pelos autoestados do operador hermitiano \hat{A} , é possível expressar este estado como uma combinação linear dos autovetores de \hat{A} ,

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \quad (3.7)$$

Multiplicando por $\langle a''|$ pela direita,

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

Usando a propriedade de ortonormalidade $\langle a''|a'\rangle = \delta_{a''a'}$, obtém-se a **projeção escalar** de $|\alpha\rangle$ sobre $|a'\rangle$

$$c_{a'} = \langle a'|\alpha\rangle, \quad (3.8)$$

Desta forma a expansão 3.7 pode-se escrever como

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

Ou como será mostrado posteriormente na página 40,

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} da' |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle$$

O operador identidade pode ser muito útil em diversas circunstâncias, por exemplo se consideramos a **norma quadrática** $\langle\alpha|\alpha\rangle$ e introduzimos o operador identidade entre o bra e o ket, obtemos

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

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

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

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

Utilizando 3.8 mostra-se que se $|\alpha\rangle$ é normalizado, logo os coeficientes da expansão 3.7 devem satisfazer ²

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \sum_{a'} |\langle a' | \alpha \rangle|^2 = \sum_{a'} |c_{a'}|^2 = 1,$$

Para o caso de operadores com autoestados contínuos

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} da' |\langle a' | \alpha \rangle|^2 = \sum_{a'} |c_{a'}|^2 = 1.$$

3.4 Representação matricial de operadores

Se \mathcal{H} e \mathcal{H}' são espaços vetoriais com dimensão finita e uma base é definida para cada espaço vetorial, logo cada transformação linear de \mathcal{H} em \mathcal{H}' pode ser representada por uma matriz. Assim uma transformação linear $T : \mathcal{H}^n \rightarrow \mathcal{H}^{*m}$ determina uma matriz $A_{m,n}$ e reciprocamente uma matriz $A_{m,n}$ determina uma transformação linear $T : \mathcal{H}^n \rightarrow \mathcal{H}^{*m}$.

No caso particular dos operadores lineares $\hat{A} : \mathcal{H}^n \rightarrow \mathcal{H}^n$ determina uma matriz $A_{n,n}$ e reciprocamente uma matriz $A_{n,n}$ pode ser atribuída a um operador linear $\hat{A} : \mathcal{H}^n \rightarrow \mathcal{H}^n$.

Tendo especificado uma base N -dimensional completa e ortonormal de kets $\{|a'\rangle\}$ é possível representar um operador \hat{A} por uma combinação linear de operadores elementares.

Usando o operador identidade duas vezes escreve-se a representação do operador \hat{A} como

²Ocorre com vetores normalizados em V^3 .

$$\hat{A} = \sum_{a''} \sum_{a'} |a''\rangle \langle a''|\hat{A}|a'\rangle \langle a'|.$$

Há em total N^2 números da forma $\langle a''|\hat{A}|a'\rangle$, onde N é a dimensionalidade do espaço dos kets. É possível organizar estes termos em uma matriz quadrada $N \times N$ de forma que os índices das colunas e linhas são como mostrado:

$$\langle a''|\hat{A}|a'\rangle$$

linha coluna

De forma explícita esta matriz pode se escrever como

$$A \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\hat{A}|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(1)}|\hat{A}|a^{(2)}\rangle & \dots & \langle a^{(1)}|\hat{A}|a^{(N)}\rangle \\ \langle a^{(2)}|\hat{A}|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(2)}|\hat{A}|a^{(2)}\rangle & \dots & \langle a^{(2)}|\hat{A}|a^{(N)}\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle a^{(N)}|\hat{A}|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(N)}|\hat{A}|a^{(2)}\rangle & \dots & \langle a^{(N)}|\hat{A}|a^{(N)}\rangle \end{pmatrix}$$

e A recebe o nome de representação matricial do operador \hat{A} .

3.4.1 Representação matricial de um operador hermitiano

A representação matricial de um observável \mathcal{A} é simples se os autoestados do operador \hat{A} são usados como os estados base,

$$\hat{A} = \sum_{a''} \sum_{a'} |a''\rangle \langle a''|\hat{A}|a'\rangle \langle a'|$$

Ocorre que a matriz $\langle a''|\hat{A}|a'\rangle$ é diagonal, isto é

$$\langle a''|\hat{A}|a'\rangle = \langle a'|\hat{A}|a'\rangle \delta_{a'a''} = a' \delta_{a'a''}$$

De forma que,

$$\hat{A} = \sum_{a'} a' |a'\rangle \langle a'|$$

ou,

$$\hat{A} = \sum_{a'} a' \Lambda_{a'}$$

De forma explícita,

$$A \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | \hat{A} | a^{(1)} \rangle & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \langle a^{(2)} | \hat{A} | a^{(2)} \rangle & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \langle a^{(N)} | \hat{A} | a^{(N)} \rangle \end{pmatrix}$$

Ou,

$$A \doteq \begin{pmatrix} a^{(1)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a^{(2)} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a^{(N)} \end{pmatrix}$$

3.5 Representação matricial das transformações lineares

3.5.1 No espaço dos ket-vectors

Seja a transformação linear no espaço dos kets

$$|\beta\rangle = \hat{A}|\alpha\rangle \tag{3.9}$$

Multiplicamos pelo bra $\langle a'|$ pela esquerda,

$$\langle a'|\beta\rangle = \langle a'|\hat{A}|\alpha\rangle$$

É introduzido o operador identidade

$$\sum_{a''} |a''\rangle \langle a''|,$$

de forma que os coeficientes da expansão de $|\beta\rangle$ são expressos por:

$$\langle a'|\beta\rangle = \sum_{a''} \langle a'|\hat{A}|a''\rangle \langle a''|\alpha\rangle$$

Esta operação pode ser vista como a aplicação da regra de multiplicação de uma matriz quadrada com uma matriz coluna que representa os coeficientes da expansão de $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$. As componentes podem ser agrupadas em uma matriz coluna

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\alpha\rangle \\ \langle a^{(2)}|\alpha\rangle \\ \vdots \\ \langle a^{(N)}|\alpha\rangle \end{pmatrix}$$

Da mesma forma para $|\beta\rangle$,

$$|\beta\rangle = \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\beta\rangle \\ \langle a^{(2)}|\beta\rangle \\ \vdots \\ \langle a^{(N)}|\beta\rangle \end{pmatrix}$$

Assim a equação 3.9 pode ser expressa em notação de matrizes por

$$\langle a'|\beta\rangle = \sum_{a''} \langle a'|\hat{A}|a''\rangle \langle a''|\alpha\rangle$$

$$\langle a^{(m)}|\beta\rangle = \sum_{n=1}^N A_{m,n} \langle a^{(n)}|\alpha\rangle$$

ou de forma explícita:

$$\begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\beta \rangle \\ \langle a^{(2)}|\beta \rangle \\ \vdots \\ \langle a^{(N)}|\beta \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\hat{A}|a^{(1)} \rangle & \langle a^{(1)}|\hat{A}|a^{(2)} \rangle & \dots & \langle a^{(1)}|\hat{A}|a^{(N)} \rangle \\ \langle a^{(2)}|\hat{A}|a^{(1)} \rangle & \langle a^{(2)}|\hat{A}|a^{(2)} \rangle & \dots & \langle a^{(2)}|\hat{A}|a^{(N)} \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle a^{(N)}|\hat{A}|a^{(1)} \rangle & \langle a^{(N)}|\hat{A}|a^{(2)} \rangle & \dots & \langle a^{(N)}|\hat{A}|a^{(N)} \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\alpha \rangle \\ \langle a^{(2)}|\alpha \rangle \\ \vdots \\ \langle a^{(N)}|\alpha \rangle \end{pmatrix}$$

3.5.2 No espaço dos bra-vectors

No caso do espaço dos bra,

$$\langle \beta | = \langle \alpha | \hat{A}$$

Multiplicando por $|a'\rangle$

$$\langle \beta | a' \rangle = \langle \alpha | \hat{A} | a' \rangle$$

Introduzindo o operador identidade,

$$\langle \beta | a' \rangle = \sum_{a''} \langle \alpha | a'' \rangle \langle a'' | \hat{A} | a' \rangle$$

$$\langle \beta | a^{(m)} \rangle = \sum_{n=1}^N \langle a^{(n)} | \alpha \rangle^* A_{m,n}$$

Neste caso, os bras são representados por matrizes linha:

$$\langle \beta | \doteq (\langle \beta | a^{(1)} \rangle, \langle \beta | a^{(2)} \rangle, \dots, \langle \beta | a^{(N)} \rangle)$$

$$\langle \alpha | \doteq (\langle a^{(1)} | \alpha \rangle^*, \langle a^{(2)} | \alpha \rangle^*, \dots, \langle a^{(N)} | \alpha \rangle^*)$$

$$\begin{aligned}
& (\langle \beta | a^{(1)} \rangle, \langle \beta | a^{(2)} \rangle, \dots, \langle \beta | a^{(N)} \rangle) = \\
& (\langle a^{(1)} | \alpha \rangle^*, \langle a^{(2)} | \alpha \rangle^*, \dots, \langle a^{(N)} | \alpha \rangle^*) \\
& \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | \hat{A} | a^{(1)} \rangle & \langle a^{(1)} | \hat{A} | a^{(2)} \rangle & \dots & \langle a^{(1)} | \hat{A} | a^{(N)} \rangle \\ \langle a^{(2)} | \hat{A} | a^{(1)} \rangle & \langle a^{(2)} | \hat{A} | a^{(2)} \rangle & \dots & \langle a^{(2)} | \hat{A} | a^{(N)} \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle a^{(N)} | \hat{A} | a^{(1)} \rangle & \langle a^{(N)} | \hat{A} | a^{(2)} \rangle & \dots & \langle a^{(N)} | \hat{A} | a^{(N)} \rangle \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

3.5.3 Representação matricial do produto interno

O produto interno $\langle \alpha | \beta \rangle$ pode ser escrito como o produto da matriz linha que representa $\langle \beta |$ com a matriz coluna que representa $|\alpha\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle \beta | \alpha \rangle &= \sum_{a'} \langle \beta | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle \\
\langle \beta | \alpha \rangle &= \left(\langle a^{(1)} | \beta \rangle^*, \langle a^{(2)} | \beta \rangle^*, \dots, \langle a^{(N)} | \beta \rangle^* \right) \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | \alpha \rangle \\ \langle a^{(2)} | \alpha \rangle \\ \vdots \\ \langle a^{(N)} | \alpha \rangle \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle a^{(1)} | \beta \rangle^* \langle a^{(1)} | \alpha \rangle + \langle a^{(2)} | \beta \rangle^* \langle a^{(2)} | \alpha \rangle + \dots + \langle a^{(N)} | \beta \rangle^* \langle a^{(N)} | \alpha \rangle$$

3.5.4 Representação matricial do produto externo

Dados o ket

$$|\beta\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \beta \rangle$$

$$|\beta\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | \beta \rangle \\ \langle a^{(2)} | \beta \rangle \\ \vdots \\ \langle a^{(N)} | \beta \rangle \end{pmatrix}$$

e o bra

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

$$\langle \alpha | \doteq (\langle \alpha | a^{(1)} \rangle, \langle \alpha | a^{(2)} \rangle, \dots, \langle \alpha | a^{(N)} \rangle) \quad (3.10)$$

O produto interno $|\beta\rangle\langle\alpha|$ é expresso por:

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

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

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

$$|\beta\rangle\langle\alpha| \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\beta\rangle \\ \langle a^{(2)}|\beta\rangle \\ \vdots \\ \langle a^{(N)}|\beta\rangle \end{pmatrix} (\langle a^{(1)}|\alpha\rangle^*, \langle a^{(2)}|\alpha\rangle^*, \dots, \langle a^{(N)}|\alpha\rangle^*)$$

Como estamos empregando os autoestados ortonormais do operador \hat{A} ,

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

$$|\beta\rangle\langle\alpha| \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\beta\rangle \langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* & \langle a^{(1)}|\beta\rangle \langle a^{(2)}|\alpha\rangle^* & \dots & \langle a^{(1)}|\beta\rangle \langle a^{(N)}|\alpha\rangle^* \\ \langle a^{(2)}|\beta\rangle \langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* & \langle a^{(2)}|\beta\rangle \langle a^{(2)}|\alpha\rangle^* & \dots & \langle a^{(2)}|\beta\rangle \langle a^{(N)}|\alpha\rangle^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle a^{(N)}|\beta\rangle \langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* & \langle a^{(N)}|\beta\rangle \langle a^{(2)}|\alpha\rangle^* & \dots & \langle a^{(N)}|\beta\rangle \langle a^{(N)}|\alpha\rangle^* \end{pmatrix}$$

Capítulo 4

Medições e Observáveis

4.1 Observáveis

Grandezas físicas que podem ser medidas como posição, momento linear, momento angular, momento de spin e outras, podem ser representadas por operadores lineares **auto-adjuntos** ou **hermitianos** no espaço de Hilbert. A totalidade de autovalores de um operador \hat{A} é denominado o espectro de \hat{A} . Como os resultados de uma medida devem ser números reais, segue que o espectro de qualquer operador que representa uma variável dinâmica deve ser real. Em alguns casos o espectro de um operador consiste apenas de autovalores discretos, em outros casos consiste de um intervalo contínuo de autovalores, ou uma mistura deles[6].

4.2 Medições

Segundo P. A. M. Dirac, “**Uma medição sempre provoca que o sistema opte por um autoestado da variável dinâmica que está sendo medida**”. Isto pode ser interpretado da forma seguinte: Antes de que uma medição do observável \mathcal{A} seja realizada assume-se que o sistema é representado por uma combinação linear

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

Quando a medida é realizada, o sistema é projetado sobre um dos autoestados por exemplo $|a'\rangle$ do observável \hat{A} ,

$$\boxed{\hat{A}|\alpha\rangle = |a'\rangle}$$

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{Medida de } \hat{A}} |a'\rangle.$$

A única exceção ocorre quando o sistema se encontra já em um dos autoestados do observável que está sendo medido, neste caso

$$|a'\rangle \xrightarrow{\text{Medida de } \hat{A}} |a'\rangle$$

com total certeza. Quando a medição provoca que $|\alpha\rangle$ mude para $|a'\rangle$ dizemos que a medida de \hat{A} é a' . É nesse sentido que o resultado de uma medição fornece um dos autovalores do observável sendo medido.

Postula-se que a probabilidade do sistema optar ou ser projetado para um autoestado particular é dada por:

$$\text{Probabilidade de } a' = |\langle a'|\alpha\rangle|^2.$$

Supondo que o sistema se encontra no estado a' antes que a medição seja realizada, logo a probabilidade de se obter a' (ou do sistema ser projetado para $|a'\rangle$), como resultado da medição é 1, o que é esperado em acordo com,

$$\text{Probabilidade de } a' = |\langle a'|a'\rangle|^2 = 1.$$

Se \mathcal{A} é medido novamente, será obtido somente $|a'\rangle$; assim, medições repetidas do mesmo observável em sucessão fornecem o mesmo resultado. Se estamos interessados na probabilidade de que o sistema inicialmente em $|a'\rangle$ ser projetado para um outro autoestado $|a''\rangle$ com $a' \neq a''$, logo,

$$\text{Probabilidade de } a'' = |\langle a''|a'\rangle|^2 = 0$$

devido à ortogonalidade entre $|a'\rangle$ e $|a''\rangle$. Do ponto de vista da teoria da medição, kets ortogonais correspondem a alternativas mutuamente excludentes.

4.2.1 Valor de expectação

O valor de expectação da variável dinâmica \mathcal{A} tomada em relação ao estado $|\alpha\rangle$ é definido como

$$\langle \hat{A} \rangle_\alpha \equiv \langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle \quad (4.1)$$

Se o operador \hat{A} possui um conjunto completo de autovetores $|a'\rangle$, com autovalores a' , logo a equação 4.1 pode ser expressa como:

$$\langle \hat{A} \rangle_\alpha = \langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle = \sum_{a'} \sum_{a''} \langle \alpha | a'' \rangle \langle a'' | \hat{A} | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle$$

Pode-se interpretar a equação como uma noção de valor médio medido. Lembrando que,

$$A \doteq \langle a'' | \hat{A} | a' \rangle$$

Se os vetores são autovetores do operador \hat{A} ,

$$A \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | \hat{A} | a^{(1)} \rangle & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \langle a^{(2)} | \hat{A} | a^{(2)} \rangle & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \langle a^{(N)} | \hat{A} | a^{(N)} \rangle \end{pmatrix}$$

Ou,

$$A \doteq \begin{pmatrix} a^{(1)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a^{(2)} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a^{(N)} \end{pmatrix}$$

Então

$$A \doteq \langle a'' | \hat{A} | a' \rangle = a' \delta_{a', a''}$$

Assim,

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

Ou explicitamente,

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle = a^{(1)} |\langle a^{(1)} | \alpha \rangle|^2 + a^{(2)} |\langle a^{(2)} | \alpha \rangle|^2 + \dots + a^{(N)} |\langle a^{(N)} | \alpha \rangle|^2$$

Os autovalores a' são os possíveis resultados dos experimentos e o coeficiente correspondente $|\langle a' | \alpha \rangle|^2$ é a probabilidade deste resultado acontecer,

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

Se $|\alpha\rangle$ é normalizado a soma de todas as probabilidades é 1,

$$\sum_{a'} |\langle a' | \alpha \rangle|^2 = \sum_{a'} |c_{a'}|^2 = 1.$$

O número complexo $c_{a'} = \langle a' | \alpha \rangle$ é denominado **amplitude de probabilidade** de encontrar esse valor medido.

Imediatamente após o resultado da medida fornecer o autovalor a' , o sistema está com certeza no estado $|a'\rangle$. Dizemos que o vetor de estado colapsou de $|\alpha\rangle$ para $|a'\rangle$.

Esta interpretação probabilística significa que a **medida do valor médio** de $\langle \hat{A} \rangle$, também chamado o **valor de expectativa** do operador \hat{A} , na realidade envolve um número infinito de medidas simples. A primeira medida fornece um certo autovalor. Logo a medida é repetida em um sistema idênticamente preparado no mesmo estado $|a'\rangle$. Isto fornece em geral um autovalor diferente como resultado. Continuando desta forma sobre um número muito grande de sistemas idênticos no mesmo estado, calculamos o valor médio de todas estas medições simples e assim obtemos o valor de expectativa $\langle \hat{A} \rangle$.

4.3 Espaços de posição e momento

4.3.1 Observáveis com espectro contínuo

Observáveis podem exibir espectros de autovalores discretos e também contínuos. A matemática rigorosa de espaços vetoriais gerados por autoestados que exibem espectro contínuo é complexa devido à dimensionalidade desse espaço ser infinita. Entretanto, muitos dos resultados dos espaços vetoriais com dimensão finita podem ser imediatamente generalizados.

Considere-se a equação de autovalores

$$\hat{\xi}|\xi'\rangle = \xi'|\xi'\rangle$$

para um operador $\hat{\xi}$ com espectro contínuo de autovalores ξ' e autoestados $|\xi'\rangle$. Considerando a analogia com os espaços vetoriais com dimensão finita podem ser feitas as seguintes substituições:

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

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

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

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

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

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

A função δ -Dirac para uma função suave $f(\xi)$ é definida por:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) \delta(\xi - a) = f(a)$$

e contribui apenas no ponto $\xi = a$, e dá zero em qualquer outro lugar.

4.4 Funções de onda nos espaços de posição e momento

4.4.1 Autoestados do operador posição

Considere-se o **operador posição** \hat{x} em uma dimensão. Postula-se em mecânica quântica que os autoestados $\{|x'\rangle\}$ do operador posição que satisfazem a relação:

$$\hat{x} |x'\rangle = x' |x'\rangle,$$

formam um conjunto completo e estão normalizados de forma que a condição de ortonormalidade é dada por

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

Um ket-vector para um estado físico arbitrário pode ser expandido em termos dos $\{|x'\rangle\}$ da forma seguinte:

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \langle x' | \alpha \rangle$$

onde o coeficiente da expansão $\langle x' | \alpha \rangle$ é interpretado de forma que,

$$|\langle x' | \alpha \rangle|^2 dx'$$

representa a probabilidade da partícula ser encontrada em um estreito intervalo dx' próximo de x' . No formalismo de Dirac, o produto interno $\langle x' | \alpha \rangle$ é normalmente definido como a **Função de Onda** $\psi_\alpha(x')$ para o estado $|\alpha\rangle$:

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

na base dos estados de posição. O **vetor de estado quântico** ou vetor de estado é então,

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_{\alpha}(x') |x'\rangle.$$

Em um instante particular de tempo, todos os valores da função de onda $\psi_{\alpha}(x')$ são as componentes de um vetor. Há uma quantidade infinita de componentes por esse motivo é empregada a integração.

$$|\alpha\rangle = \sum_{x'} |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle = \langle x^{(1)}|\alpha\rangle |x^{(1)}\rangle + \langle x^{(2)}|\alpha\rangle |x^{(2)}\rangle + \dots + \langle x^{(N)}|\alpha\rangle |x^{(N)}\rangle + \dots$$

$$|\alpha\rangle = \sum_{x'} \psi_{\alpha}(x') |x'\rangle = \psi_{\alpha}(x^{(1)}) |x^{(1)}\rangle + \psi_{\alpha}(x^{(2)}) |x^{(2)}\rangle + \dots + \psi_{\alpha}(x^{(N)}) |x^{(N)}\rangle + \dots$$

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} \psi_{\alpha}(x^{(1)}) \\ \psi_{\alpha}(x^{(2)}) \\ \vdots \\ \psi_{\alpha}(x^{(N)}) \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

As grandezas,

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

e

$$\psi_{\alpha}(x') \equiv \langle x'|\alpha\rangle,$$

são apresentadas como postulados separados em Mecânica Quântica ondulatória. Na formulação de Dirac as duas interpretações probabilísticas estão unificadas.

Consideremos agora o produto interno $\langle \beta|\alpha\rangle$ e usando,

$$\hat{I} = \int dx' |x'\rangle \langle x'|,$$

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

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

De forma que o produto interno $\langle \beta | \alpha \rangle$ caracteriza a superposição entre as duas funções de onda, isto é representa a amplitude de probabilidade do estado $|\alpha\rangle$ estar no estado $|\beta\rangle$. A seguir, considere-se a expansão geral do estado $|\alpha\rangle$ na base $\{|a'\rangle\}$ formada pelos autoestados do operador \hat{A} ,

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

Vamos interpretar esta expansão usando o conceito de função de onda. Para isto, multiplique-se a expansão por um autoestado do operador posição $\langle x' |$ pela esquerda,

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

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

$$\psi_\alpha(x') = \sum_{a'} c_{a'} \langle x' | a' \rangle$$

o termo $\langle x' | a' \rangle$ é a **autofunção** para o autoestado $|a'\rangle$ na base dos autoestados $\{|x'\rangle\}$, do operador posição \hat{x} , com autovalor a' denotada por $\varphi_{a'}(x')$. Assim,

$$\varphi_{a'}(x') = \langle x' | a' \rangle$$

$$\psi_\alpha(x') = \sum_{a'} c_{a'} \varphi_{a'}(x'),$$

4.4.2 Valor de expectativa usando funções de onda

A seguir será examinado, como $\langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle$ pode ser escrita usando as funções de onda para $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$,

$$\langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle = \int dx' \int dx'' \langle \beta | x' \rangle \langle x' | \hat{A} | x'' \rangle \langle x'' | \alpha \rangle \quad (4.2)$$

$$\langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle = \int dx' \int dx'' \psi_\beta^*(x') \langle x' | \hat{A} | x'' \rangle \psi_\alpha(x'') \quad (4.3)$$

Para poder avaliar $\langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle$ é necessário conhecer os valores de dos elementos de matriz $\langle x' | \hat{A} | x'' \rangle$ que em geral, são funções de duas variáveis x' e x'' . Entretanto, há uma grande simplificação se o observável \hat{A} é função do operador posição x . Se considera-se o caso particular,

$$\hat{A} = \hat{x}^2 \quad (4.4)$$

Então,

$$\langle x' | \hat{x}^2 | x'' \rangle = \langle x' | \rangle \cdot \langle \hat{x}''^2 | x'' \rangle = x'^2 \delta(x - x'') \quad (4.5)$$

Logo, a integral dupla 4.3 pode ser reduzida a uma única integral,

$$\langle \beta | \hat{x}^2 | \alpha \rangle = \int dx' \psi_\beta^*(x') x'^2 \psi_\alpha(x') \quad (4.6)$$

De forma geral,

$$\langle \beta | f(\hat{x}) | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_\beta^*(x') f(x') \psi_\alpha(x').$$

4.5 Representação do operador momento na base dos estados de posição

4.5.1 Operador translação

Considere-se um estado bem localizado em torno do ponto x . Considere-se também a operação que muda este estado em outro estado bem localizado em torno do ponto $x + dx$. Esta operação é uma translação infinitesimal por dx' e o operador \mathcal{T}

$$\mathcal{T}(dx')|x'\rangle = |x' + dx'\rangle. \quad (4.7)$$

De forma explícita o operador de deslocamento espacial é pode ser expresso por,

$$\mathcal{T}(dx') = 1 - \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x dx'. \quad (4.8)$$

Agora, vamos examinar a representação do operador **momento linear** \hat{p} na base dos autoestados $|x'\rangle$ do operador **posição**. Como ponto de partida emprega-se a definição de momento como gerador de translações infinitesimais:

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x dx'\right)|\alpha\rangle = \int dx' \mathcal{T}(\Delta x')|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \quad (4.9)$$

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x dx'\right)|\alpha\rangle = \int dx' |x' + \Delta x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \quad (4.10)$$

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x dx'\right)|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle\langle x' - \Delta x'|\alpha\rangle \quad (4.11)$$

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x dx'\right)|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle\left(\langle x'|\alpha\rangle - \Delta x' \frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle\right) \quad (4.12)$$

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x dx'\right)|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle\left(1 - \Delta x' \frac{\partial}{\partial x'}\right)\langle x'|\alpha\rangle \quad (4.13)$$

Da comparação de ambos os membros,

$$\hat{p}_x|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\alpha\rangle \right) \quad (4.14)$$

Ou,

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

Onde a propriedade de ortonormalidade dos estados de posição foi empregada.

Para o elemento de matriz de \hat{p}_x na representação da base do operador posição obtem-se:

$$\langle x'|\hat{p}_x|x''\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \delta(x' - x''). \quad (4.15)$$

Da equação 4.14 obtem-se,

$$\langle \beta|\hat{p}_x|\alpha\rangle = \int dx' \langle \beta|x'\rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\alpha\rangle \right) \quad (4.16)$$

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

4.6 Função de onda no espaço de momento

Os kets de posição $|p_x'\rangle \equiv |p'\rangle$, em uma dimensão espacial, satisfazem a relação,

$$\hat{p}|p'\rangle = p'|p'\rangle \quad (4.17)$$

e,

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p' - p''). \quad (4.18)$$

Um ket arbitrário pode ser expandido na base dos autoestados de momento,

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp' |p'\rangle \langle p'|\alpha\rangle \quad (4.19)$$

Define-se a **Função de Onda no Espaço de Momento** $\phi_\alpha(p')$ como

$$\langle p' | \alpha \rangle = \phi_\alpha(p')$$

É possível atribuir uma interpretação probabilística aos coeficientes da expansão $\langle p' | \alpha \rangle$; a probabilidade de que uma medida de \hat{p} forneça o autovalor p' em um estreito intervalo dp' é $|\langle p' | \alpha \rangle|^2 dp'$

Se $|\alpha\rangle$ é normalizado, obtem-se

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp' \langle \alpha | p' \rangle \langle p' | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp' |\phi_\alpha(p')|^2 = 1$$

4.6.1 Relação entre as representações de posição e momento

Vamos estabelecer a conexão entre as representações no espaço de posição e de momento. Para isto, partimos da equação,

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

com $|\alpha\rangle$ substituído pelo autoestado de momento $|p'\rangle$. Assim,

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

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

Esta é uma equação diferencial,

$$\frac{i}{\hbar} p' dx' = \frac{d\langle x' | p' \rangle}{\langle x' | p' \rangle}$$

cuja solução é,

$$\langle x' | p' \rangle = N \exp\left(\frac{i p' x'}{\hbar}\right).$$

N é uma constante de normalização a ser determinada. Embora temos uma função de duas variáveis x' e p' , vamos considerar inicialmente que a função depende de x' com p'

fixo. $\langle x'|p'\rangle$ é a função de onda para o autoestado de momento $|p'\rangle$, frequentemente denominada autofunção de momento (ainda no espaço de posição). A equação indica que a função de onda de um autoestado do operador momento é uma onda plana.

Para obter a constante de normalização N consideremos,

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

O lado esquerdo é $\delta(x' - x'')$ e o lado direito pode ser avaliado usando a forma explícita para $\langle x'|p'\rangle$,

$$\delta(x' - x'') = \int dp' N \exp\left(\frac{i p' x'}{\hbar}\right) N^* \exp\left(\frac{-i p' x''}{\hbar}\right)$$

$$\delta(x' - x'') = |N|^2 \int dp' \exp\left[\frac{i p' (x' - x'')}{\hbar}\right]$$

$$\delta(x' - x'') = 2\pi\hbar |N|^2 \delta(x' - x'')$$

$$N = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

Tomando N real e positivo por convenção, obtem-se:

$$\langle x'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i p' x'}{\hbar}\right).$$

Para mostrar como estão relacionadas as funções de onda no espaço de posição e a função de onda no espaço de momento, reescrevemos

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

e,

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

como:

$$\psi_{\alpha}(x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp' \exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right) \phi_{\alpha}(p')$$

e,

$$\phi_{\alpha}(p') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx' \exp\left(\frac{-ip'x'}{\hbar}\right) \psi_{\alpha}(x').$$

As equações representam as transformadas de Fourier das funções de onda ¹.

4.6.2 Pacote de onda Gaussiano

Considere a função de onda do pacote de onda Gaussiano na representação do espaço de posição,

$$\psi_{\alpha}(x') = \langle x'|\alpha\rangle = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{d}} \exp\left[ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}\right].$$

Esta é uma onda plana com um número de onda k modulada por um perfil Gaussiano centralizado na origem do espaço unidimensional. A densidade de probabilidade de posição $|\langle x'|\alpha\rangle|^2$ possui também um perfil Gaussiano com largura d .

Serão calculados os valores de expectativa de \hat{x} , \hat{x}^2 , \hat{p} , e \hat{p}^2 .

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi_{\alpha}^{*}(x') x' \psi_{\alpha}(x')$$

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \alpha | x' \rangle x' \langle x' | \alpha \rangle$$

$$\langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' x' |\langle x' | \alpha \rangle|^2 = 0$$

Por simetria.

Para \hat{x}^2 obtem-se,

¹Jean-Baptiste Joseph Fourier (Auxerre, 21 de março de 1768 Paris, 16 de maio de 1830) foi um matemático e físico francês.

$$\langle \alpha | \hat{x}^2 | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' x'^2 |\langle x' | \alpha \rangle|^2$$

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi d}} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx' x'^2 \exp \left[\frac{-x'^2}{d^2} \right]$$

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{d^2}{2}$$

Com estes resultados podemos calcular o valor médio do quadrado do desvio padrão do operador \hat{x} , $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ é:

$$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 = \frac{d^2}{2}$$

Os valores de expectação de \hat{p} e \hat{p}^2 são respectivamente:

$$\langle \hat{p} \rangle = \hbar k$$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2d^2} + \hbar^2 k^2.$$

O valor médio do quadrado do desvio padrão do operador \hat{p} , $\langle (\Delta p)^2 \rangle$ é:

$$\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{2d^2}.$$

Com estes resultado é possível verificar o princípio de incerteza de Heisenberg,

$$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}.$$

Capítulo 5

Dinâmica Quântica

5.1 Evolução temporal

A seguir vamos descrever a dinâmica dos estados (ket-vectors) e observáveis. É importante salientar que o tempo é tratado como um parâmetro na Mecânica Quântica e não como um operador, particularmente ele não é um observável no sentido definido nos capítulos anteriores.

5.2 Operador de evolução temporal

Considere-se um sistema físico cujo estado em t_0 é representado por $|\alpha\rangle$. Após um intervalo de tempo o estado é representado por:

$$|\alpha, t_0; t\rangle, \quad (t > t_0),$$

Como o tempo é associado a um parâmetro contínuo, espera-se

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\alpha, t_0; t\rangle = |\alpha\rangle$$

Será empregada a notação,

$$|\alpha, t_0; t_0\rangle \equiv |\alpha, t_0\rangle,$$

O objetivo então é o estudo da evolução temporal do estado $|\alpha\rangle$ sob um deslocamento

temporal $t_0 \rightarrow t$

$$|\alpha\rangle = |\alpha, t_0\rangle \xrightarrow{\text{Evolução temporal}} |\alpha, t_0; t\rangle.$$

Os dois estados estão relacionados por um operador denominado **Operador de evolução temporal** denotado $\hat{U}(t, t_0)$:

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle.$$

Vamos supor que em t_0 o estado é expandido em termos dos autoestados de algum observável \hat{A} :

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t_0)|a'\rangle,$$

Se o ket está inicialmente normalizado à unidade, deverá permanecer normalizado à unidade em qualquer tempo posterior:

$$\langle\alpha, t_0|\alpha, t_0\rangle = 1 \Rightarrow \langle\alpha, t_0; t|\alpha, t_0; t\rangle = 1.$$

Esta propriedade é satisfeita se o operador de evolução temporal é unitário,

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \hat{I}.$$

5.2.1 Operador de evolução temporal infinitesimal

É de utilidade definir um operador de evolução temporal infinitesimal $\hat{U}(t_0 + dt, t_0)$:

$$|\alpha, t_0; t_0 + dt\rangle = \hat{U}(t_0 + dt, t_0)|\alpha, t_0\rangle$$

Este operador deve convergir para o operador unitário na medida que dt tende a zero.

$$\lim_{dt \rightarrow 0} \hat{U}(t_0 + dt, t_0) = \hat{I}.$$

Espera-se que a diferença entre $\hat{U}(t_0 + dt, t_0)$ e \hat{I} seja de primeira ordem em dt . Estas propriedades são satisfeitas por

$$\hat{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 - i\hat{\Omega}dt.$$

onde $\hat{\Omega}$ é um operador hermitiano,

$$\hat{\Omega}^\dagger = \hat{\Omega}$$

O operador possui unidades de frequência. Lembrando que $E = \hbar\omega$, relacionamos $\hat{\Omega}$ com o operador Hamiltoniano \hat{H} :

$$\hat{\Omega} = \frac{\hat{H}}{\hbar}$$

Desta forma o operador de evolução temporal infinitesimal pode ser escrito como:

$$\hat{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}dt.$$

Onde assumimos que o operador Hamiltoniano é hermitiano,

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H}.$$

5.3 A equação de Schrödinger

Segundo um dos postulados da Mecânica Quântica um vetor de estado

$$|\alpha, t\rangle,$$

varia no tempo em acordo com a Equação de Schrödinger,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha, t\rangle = \hat{H}|\alpha, t\rangle.$$

É possível derivar uma equação diferencial fundamental para o operador de evolução temporal $\hat{U}(t, t_0)$. Para isto aplicamos a propriedade de composição:

$$\widehat{U}(t + dt, t_0) = \widehat{U}(t + dt, t)\widehat{U}(t, t_0)$$

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

Onde a diferença temporal $t - t_0$ não precisa ser infinitesimal. Temos então,

$$\widehat{U}(t + dt, t_0) - \widehat{U}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \widehat{H} dt \widehat{U}(t, t_0)$$

o qual pode ser escrito na forma de uma equação diferencial:

$$i\hbar \left[\frac{\widehat{U}(t + dt, t_0) - \widehat{U}(t, t_0)}{dt} \right] = \widehat{H} \widehat{U}(t, t_0)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \widehat{U}(t, t_0) = \widehat{H} \widehat{U}(t, t_0).$$

Esta é a **Equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal**. A partir desta equação pode-se obter a **Equação de Schrödinger para um estado quântico** multiplicando ambos os membros da equação pelo estado $|\alpha, t_0\rangle$, obtem-se:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \widehat{U}(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle = \widehat{H} \widehat{U}(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle.$$

Mas $|\alpha, t_0\rangle$ não depende do tempo t , de forma que esta equação é a mesma que

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle = \widehat{H} |\alpha, t_0; t\rangle.$$

Se $\widehat{U}(t, t_0)$ é dado, e adicionalmente, conhecemos como $\widehat{U}(t, t_0)$ atua sobre o estado inicial $|\alpha, t_0\rangle$ não é necessário se preocupar com a última equação de Schrödinger para o ket de estado. Todo o que precisa ser feito é aplicar $\widehat{U}(t, t_0)$ a $|\alpha, t_0\rangle$; e desta forma é possível obter o ket de estado em qualquer tempo t .

5.4 Teorema de Ehrenfest

Assim como uma variável dinâmica $\mathcal{A}(t)$ pode depender do tempo, o correspondente operador quântico $\hat{A}(t)$ também pode depender do tempo t . O valor de expectação,

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \langle \alpha; t | \hat{A}(t) | \alpha; t \rangle$$

possui dependência temporal em $\hat{A}(t)$, em $|\alpha; t\rangle$ e em $\langle \alpha; t|$.

Com auxílio das equações:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle = \hat{H} |\alpha, t\rangle.$$

e,

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha, t| = \langle \alpha, t| \hat{H}.$$

pode-se avaliar a derivada temporal do valor de expectação do operador $\hat{A}(t)$,

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A}(t) \rangle = \frac{\partial}{\partial t} [\langle \alpha, t | \hat{A}(t) | \alpha, t \rangle] + \langle \alpha, t | \hat{A}(t) \left[\frac{\partial}{\partial t} | \alpha, t \rangle \right] + \langle \alpha, t | \left[\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(t) \right] | \alpha, t \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A}(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \alpha, t | \hat{H} \hat{A}(t) | \alpha, t \rangle + -\frac{i}{\hbar} \langle \alpha, t | \hat{A}(t) \hat{H} | \alpha, t \rangle + \langle \alpha, t | \left[\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(t) \right] | \alpha, t \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A}(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \alpha, t | [\hat{H}, \hat{A}] | \alpha, t \rangle + \langle \alpha, t | \left[\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(t) \right] | \alpha, t \rangle$$

Em forma compacta,

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle \hat{A}(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle.}$$

Esta expressão é denominada Teorema de Ehrenfest ¹, pela sua semelhança com os re-

¹Paul Ehrenfest (Viena, 18 de janeiro de 1880, Amsterdam, 25 de setembro de 1933) foi um físico e matemático austríaco.

sultados da Mecânica Clássica, e indica que a variação temporal de um valor de expectativa mecânico quântico é igual à variação temporal da correspondente variável clássica. Quando o operador \hat{A} não possui dependência temporal explícita e também comuta com o operador hamiltoniano \hat{H} observa-se que $\langle \hat{A} \rangle$ é constante no tempo, isto é é uma grandeza conservada. Este operador corresponde a uma simetria do sistema físico. Frequentemente (mas nem sempre) o operador \hat{A} é independente do tempo, de forma que sua derivada em relação ao tempo é nula e então pode-se ignorar o último termo da equação.

Foi estabelecido que o Teorema de Ehrenfest é uma consequência da Equação de Schrödinger. Entretanto, o contrário é também verdadeiro isto é a equação de Schrödinger pode ser obtida a partir do Teorema de Ehrenfest[7].

5.4.1 Observáveis conservados

Se um operador associado a uma grandeza física observável não depende explicitamente do tempo obtemos um caso particular do Teorema de Ehrenfest,

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A}(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle.$$

Neste caso, a evolução temporal do valor de expectativa é determinada apenas pelo comutador do operador \hat{A} com o Hamiltoniano \hat{H} . **Se o operador \hat{A} comuta com o Hamiltoniano \hat{H} , o valor de expectativa permanece constante no tempo ou então dizemos que o observável é conservado.**

$$[\hat{H}, \hat{A}] = \hat{0} \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{A}(t) \rangle = \hat{0} \Rightarrow \langle \hat{A}(t) \rangle = \text{constante}.$$

5.4.2 Hamiltoniano independente do tempo

O operador Hamiltoniano \hat{H} pode em geral depender do tempo. Quando isto não ocorre, dizemos que temos um estado estacionário. A partir do Teorema de Ehrenfest pode-se determinar que a energia média do sistema é constante ou então é uma grandeza conservada

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \widehat{H} \rangle = \frac{i}{\hbar} [\widehat{H}, \widehat{H}] = 0$$

$$\langle \widehat{H} \rangle = \text{cte.}$$

Nesta situação importante a equação de Schrödinger pode ser facilmente integrada para fornecer:

$$\frac{d \widehat{U}(t, t_0)}{\widehat{U}(t, t_0)} = -\frac{i}{\hbar} \widehat{H} dt$$

$$\widehat{U}(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \widehat{H} (t - t_0) \right].$$

5.5 Estados estacionários e a base da energia

Para poder avaliar o efeito do operador de evolução temporal sobre um ket arbitrário inicial $|\alpha\rangle$, é necessário primeiramente conhecer como ele atua nos kets base usados na expansão de $|\alpha\rangle$. Isto é direto se os kets base empregados são os autovetores de \widehat{A} de forma que

$$[\widehat{A}, \widehat{H}] = \widehat{0};$$

logo os autovetores de \widehat{A} são também autovetores de \widehat{H} , denominados **autovetores de energia** $|a'\rangle$ cujos autovalores são denotados por $E_{a'} \equiv E'$:

$$\widehat{H}|E'\rangle = E'|E'\rangle,$$

onde substituímos $|a'\rangle \equiv |E'\rangle$.

Agora é possível expandir o operador de evolução temporal em termos de $|E'\rangle\langle E'|$. Tomando $t_0 = 0$ por simplicidade, obtem-se:

$$\widehat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar} \widehat{H} t} = \sum_{E'} \sum_{E''} |E''\rangle \langle E''| e^{-\frac{i}{\hbar} \widehat{H} t} |E'\rangle \langle E'|$$

$$\hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \sum_{E'} |E'\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E't} \langle E'|.$$

O operador de evolução temporal escrito em esta forma possibilita resolver qualquer problema de valor inicial uma vez que a expansão do ket inicial em termos de $|E'\rangle$ é conhecido. Como exemplo, vamos supor que a expansão do ket inicial é da forma

$$|\alpha, t_0 = 0\rangle = \sum_{E'} |E'\rangle \langle E'|\alpha\rangle = \sum_{E'} c_{E'} |E'\rangle,$$

logo obtém-se,

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |\alpha, t_0 = 0\rangle = \sum_{E'} |E'\rangle \langle E'|\alpha\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E't}.$$

Em outras palavras, os coeficientes da expansão mudam no tempo em acordo com

$$c_{E'}(t = 0) \rightarrow c_{E'}(t) = c_{E'}(t = 0) e^{-\frac{i}{\hbar}E't},$$

com o seu módulo invariante. As fases relativas entre as várias componentes podem variar no tempo por que as frequências de oscilação são diferentes.

Um caso particular de interesse ocorre quando o estado inicial é um dos próprios $|E'\rangle$. Assim temos inicialmente,

$$|\alpha, t_0 = 0\rangle = |E'\rangle,$$

e em um tempo posterior,

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = |E'\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E't}.$$

Assim, se o sistema é inicialmente um autoestado simultâneo de \hat{A} e \hat{H} , ele permanece assim o tempo todo. O máximo que pode acontecer é a modulação de fase $e^{-\frac{i}{\hbar}E't}$. É em esse sentido que um observável compatível com \hat{H} é uma constante de movimento.

Um **estado estacionário** $|E, t\rangle$, possui então uma dependência temporal exponencial simples,

$$|E', t\rangle = |E'\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E't}$$

Onde $|E'\rangle$ é o vetor de estado em $t = 0$. Usando este estado na equação de Schrödinger dependente do tempo,

$$\widehat{H}|E'\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E' t} = i \hbar |E'\rangle \left(-\frac{i}{\hbar}E' \right) e^{-\frac{i}{\hbar}E' t}$$

ele deve satisfazer,

$$\widehat{H}|E'\rangle = E'|E'\rangle.$$

Os estados estacionários são por tanto os autovetores do Hamiltoniano com E' sendo o correspondente autovalor de energia. Em uma dada base ortonormal $|a'\rangle$, os autoestados serão da forma,

$$|E\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|E\rangle$$

$$|E\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle$$

com as amplitudes $c_{a'}$, dadas por:

$$c_{a'} = \langle a'|E\rangle$$

É possível escrever a equação de autovalores de forma matricial como

$$Hc_{a'} = E'c_{a'}$$

$$|E\rangle = \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|E\rangle \\ \langle a^{(2)}|E\rangle \\ \vdots \\ \langle a^{(N)}|E\rangle \end{pmatrix}$$

$$|E\rangle = \begin{pmatrix} c_{(1)} \\ c_{(2)} \\ \vdots \\ c_{(N)} \end{pmatrix}$$

onde H é a matriz do Hamiltoniano em esta base e $c_{a'}$ é a matriz de uma coluna que representa o vetor $|E'\rangle$. Explícitamente,

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \dots & H_{1N} \\ H_{21} & H_{22} & \dots & H_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N1} & H_{N2} & \dots & H_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{(1)} \\ c_{(2)} \\ \vdots \\ c_{(N)} \end{pmatrix} = E' \begin{pmatrix} c_{(1)} \\ c_{(2)} \\ \vdots \\ c_{(N)} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|H|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(1)}|H|a^{(2)}\rangle & \dots & \langle a^{(1)}|H|a^{(N)}\rangle \\ \langle a^{(2)}|H|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(2)}|H|a^{(2)}\rangle & \dots & \langle a^{(2)}|H|a^{(N)}\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle a^{(N)}|H|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(N)}|H|a^{(2)}\rangle & \dots & \langle a^{(N)}|H|a^{(N)}\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{(1)} \\ c_{(2)} \\ \vdots \\ c_{(N)} \end{pmatrix} = E' \begin{pmatrix} c_{(1)} \\ c_{(2)} \\ \vdots \\ c_{(N)} \end{pmatrix}$$

Temos então N equações para as amplitudes desconhecidas $c_{a'}$. Como o conjunto de equações é homogêneo, teremos apenas soluções não triviais quando o determinante formado pelos seus coeficientes é zero.

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E^{(1)} & H_{12} & \dots & H_{1N} \\ H_{21} & H_{22} - E^{(2)} & \dots & H_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N1} & H_{N2} & \dots & H_{NN} - E^{(N)} \end{vmatrix} = 0$$

Avaliando o determinante encontra-se uma equação polinomial de grau N . Os autovalores de energia são os zeros da equação. Como o Hamiltoniano é hermitiano todos os autovalores são reais. Para cada autovalor E' pode-se encontrar as amplitudes $c_{a'}$ as quais formam logo os autovetores correspondentes $|E'\rangle$.

É conveniente normalizar todos os autovetores à unidade. Autovalores diferentes terão autovetores ortogonais. Se alguns autovalores são iguais, o espectro do operador é degenerado. Os correspondentes autovetores não são necessariamente ortogonais entre eles,

entretanto, tomando combinações lineares isto pode ser obtido (ortogonalidade).

Finalmente, teremos um conjunto completo,

$$\sum_{E'} |E'\rangle \langle E'| = \hat{I}.$$

de autovetores ortonormais $\langle E''|E'\rangle = \delta_{E''E'}$, que fornecem uma nova base no espaço de Hilbert que estamos trabalhando.

Esta nova base é particularmente útil para descrever a evolução temporal de um vetor de estado arbitrário $|\alpha\rangle$.

5.6 Relação entre as Mecânicas Matricial e Ondulatória

O operador de evolução temporal é definido como,

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle$$

O operador evolução é obtido a partir da **Equação de Schrödinger dependente do tempo** da forma seguinte,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle = \hat{H}(t) |\alpha, t_0; t\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle$$

Como esta equação é válida para qualquer escolha de $|\alpha, t_0\rangle$, podemos concluir que,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0)$$

Devido ao fato de que a equação de Schrödinger preserva a normalização de um vetor de estado no decorrer do tempo o operador de evolução temporal é unitário,

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \hat{I}$$

Se o operador de evolução temporal \hat{U} é conhecido e também o estado inicial de um sistema particular, será necessário aplicar o operador evolução temporal ao vetor de estado inicial para determinar o vetor de estado em um tempo posterior.

$$\hat{U}(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle = |\alpha, t_0; t\rangle$$

Conhecendo o estado inicial de um sistema é possível obter o valor de expectativa de um operador \hat{A} em um tempo posterior,

$$\langle A(t) \rangle = \langle \alpha, t_0; t | \hat{A} | \alpha, t_0; t \rangle = \langle \alpha, t_0 | \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0) | \alpha, t_0 \rangle.$$

A equação anterior pode ser interpretada de duas formas, uma de elas é considerar ao operador \hat{A} como independente do tempo e considerar que toda a dependência temporal do seu valor de expectativa vem do vetor de estado. Este ponto de vista é denominado **Formulação de Schrödinger**. Alternativamente, pode-se considerar que o operador evolui no tempo, no entanto que o vetor de estado permanece constante. Isto é conhecido como a **Formulação de Heisenberg**. Neste último caso a evolução temporal do operador \hat{A} é dada por,

$$\hat{A}(t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0)$$

e o vetor de estado é o vetor de estado inicial $|\alpha, t_0\rangle$.

No caso particular no qual o Hamiltoniano é independente do tempo é possível obter uma expressão explícita para o operador de evolução temporal,

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}}$$

desta forma a evolução temporal de um vetor de estado é dado por,

$$|\alpha, t_0; t\rangle = e^{-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}} |\alpha, t_0\rangle.$$

Então, a evolução temporal de um operador na formulação de Heisenberg é,

$$\hat{A}(t) = e^{+\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}} \hat{A} e^{-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}}.$$

5.6.1 A equação de movimento de Heisenberg

Na formulação de Heisenberg os observáveis mecânico quânticos evoluem no tempo seguindo a equação de movimento de Heisenberg. Pose-se estudar a evolução de um operador de Heisenberg diferenciando em relação ao tempo,

$$\frac{d}{dt}\hat{A}(t) = \frac{d}{dt}\left[\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{A}\hat{U}(t, t_0)\right]$$

$$\frac{d}{dt}\hat{A}(t) = \frac{\partial\hat{U}^\dagger}{\partial t}\hat{A}\hat{U} + \hat{U}^\dagger\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\hat{U} + \hat{U}^\dagger\hat{A}\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}$$

como,

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}$$

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) = e^{+i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}$$

então,

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U}(t, t_0)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^\dagger(t, t_0) = \frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U}^\dagger(t, t_0).$$

Assim,

$$\frac{d}{dt}\hat{A}(t) = -\frac{i}{\hbar}\hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U} + \frac{i}{\hbar}\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U} + \left(\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right)$$

$$\frac{d}{dt}\hat{A}(t) = -\frac{i}{\hbar}\left(\left[\hat{A}^{(H)}, \hat{H}\right]_H\right) + \left(\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right)_H.$$

Esta é a **Equação de movimento de Heisenberg**, onde,

$$\hat{A}^{(H)} = \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U}.$$

$$\hat{H} = \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U}.$$

O **Teorema de Ehrenfest** é a **Representação de Heisenberg** da mecânica quântica, o teorema também é altamente relacionado com o **Teorema de Liouville** da mecânica hamiltoniana, que envolve os Parênteses de Poisson ao invés do comutador.

$$\frac{d}{dt} \hat{A}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}(t), \hat{H}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t},$$

Projetando nos estados $\langle \alpha |$ e $|\alpha \rangle$,

$$\langle \alpha | \frac{d}{dt} \hat{A}(t) | \alpha \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle \alpha | [\hat{A}(t), \hat{H}] | \alpha \rangle + \langle \alpha | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \alpha \rangle,$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A}(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{A}(t), \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle.$$

Teorema de Liouville

É um resultado da mecânica hamiltoniana sobre a evolução temporal de um sistema mecânico. Considera-se um conjunto de partículas com condições iniciais próximas que podem ser representadas no espaço de fases por uma região conexa, a qual, apesar de se expandir e contrair a medida que cada partícula evolua, manterá invariante seu volume. O teorema de Liouville pode ser reescrito em termos do colchete de Poisson. Essa forma alternativa, conhecida como equação de Liouville, vem a ser dada por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\{\rho, H\}.$$

Em termos do operador de Liouville

$$L = \sum_{i=1}^d \left[\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q^i} - \frac{\partial H}{\partial q^i} \frac{\partial}{\partial p_i} \right]$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + L\rho = 0.$$

O análogo deste teorema em mecânica quântica é o teorema de Ehrenfest

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = -\frac{i}{\hbar} [\rho, H].$$

onde ρ é a matriz densidade. Quando se aplica o resultado ao valor esperado de um observável, a correspondente equação dada pelo teorema de Ehrenfest toma a forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle \hat{A} \rangle = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}].$$

5.6.2 Quadro quântico e clássico

Quando comparamos a equação de movimento de Heisenberg quântica com a equação clássica de movimento na forma de parênteses de Poisson para $A(q, p)$ que não depende explicitamente do tempo observamos que a regra de quantização de Dirac

$$[,]_{\text{clássico}} \rightarrow \frac{[,]}{i\hbar}$$

conduz à correta equação em mecânica quântica.

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \{H, A\},$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle \hat{A} \rangle = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}].$$

A mecânica clássica pode ser derivada da mecânica quântica, mas o oposto não é verdade.

5.6.3 Relações de comutação canônica

São relações fundamentais entre as quantidades conjugadas canônicas (quantidades que são relacionadas, por definição, de modo que uma seja a transformada de Fourier de outra).

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0,$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0,$$

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}.$$

Considerações finais

Foi realizada uma revisão bibliográfica do formalismo matemático da Mecânica Quântica usando como base livros didáticos de nível de graduação e pós-graduação.

Esta revisão bibliográfica serviu para que eu pudesse aprimorar os conhecimentos de mecânica quântica, pois no curso de licenciatura em Ensino de Física tive contato apenas com a introdução à mecânica quântica.

A mecânica Quântica está fundamentada em poucos princípios axiomáticos que não podem ser demonstrados mas se justificam pelo sucesso da sua aplicação a situações do mundo real. Os conceitos matemáticos fundamentais são os espaços vetoriais de Hilbert, os vetores que pertencem a esses espaços e as transformações lineares que atuam sobre esses vetores. Os operadores são transformações lineares que atuam sobre os estados quânticos. No formalismo de Heisenberg os operadores dependem do tempo e os estados quânticos são estacionários. Na formulação de Schrödinger os operadores não dependem do tempo ao contrário dos estados que evoluem no tempo. Com essas informações básicas, é possível compreender as formulações de Heisenberg e Schrödinger no contexto do formalismo de Dirac.

A mecânica quântica estuda o movimento das partículas na escala de dimensões de tamanho da ordem de 10^{-10} m ou menores (inclui aglomerados de matéria, moléculas, clusters, átomos e partículas subatômicas).

Através do presente trabalho foi possível ter uma melhor compreensão dos fundamentos físicos e matemáticos do princípio de incerteza. A revisão bibliográfica descrita acima propôs um aprofundamento no formalismo da mecânica quântica. Os conceitos do espaço de Hilbert que demonstram que o estado do sistema é definido em cada instante por um vetor norma, o espaço dos kets, espaço dual, o espaço dos bra as operações entre brackets, expansão de um ket, as transformações e operadores lineares, representação matricial

de estados e operadores, medições e observáveis e a dinâmica quântica, são de grande importância para a aprendizagem do formalismo apresentado pela Física quântica. Sem a compreensão desses conceitos os estudos relacionados a mecânica quântica se tornam muito difícil.

Referências Bibliográficas

- [1] GRIFFITHS, David J., Mecânica Quântica, Bookman Ed. Pearson Prentice Hall. 2nd ed. (2011).
- [2] Adaptado de Wikipedia, a enciclopédia livre. Acesso em 25/09/2017.
Disponível em https://pt.wikipedia.org/wiki/Desvio_padrão
- [3] Adaptado de Wikipedia, the free encyclopedia. Acesso em 27/09/2017.
Disponível em https://en.wikipedia.org/wiki/Correspondence_principle
- [4] SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, Jim, Mecânica Quântica Moderna, Bookman 2nd Ed. (2013).
- [5] DIRAC, P. A. M., The principles of Quantum Mechanics, Oxford University Press, 3rd (1948).
- [6] SUSSKIND, L.; FRIEDMAN, A., Quantum Mechanics, Published by Basic Books, 2nd (2014).
- [7] EISBERG, R.; RESNICK, R., Física Quântica, Campus, 9rd (1994).