Estrutura geral da Mecânica Quântica

Neste capítulo desenvolveremos o formalismo da Mecânica Quântica. Terminologia, notação e base matemática necessária para descrever a estrutura da teoria e que permite estender a interpretação estatística para qualquer observável. No desenvolvimento do formalismo enunciaremos os princípios fundamentais da Mecânica Quântica e discutiremos os conceitos necessários para entendê-los.

1 Postulados da Mecânica Quântica

Postulado 1 *O estado do sistema é representado por um vetor num espaço vetorial complexo munido de um produto escalar hermiteano, o espaço de vetores de estado.*

Notação: vetor de estado, $|\psi\rangle$.
Produto escalar de dois vetores: $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$, $\langle\phi|\psi\rangle$.

Postulado 2 (Generalização da hipótese estatística) *Os observáveis são representados por operadores hermiteanos. O resultado da medida de um observável $\hat{A}$ é um dos seus autovalores. A probabilidade de acharmos o valor a_i numa medida de $\hat{A}$, se o sistema está no estado $|\psi\rangle$, é o módulo ao quadrado do produto escalar de $|\psi\rangle$ com o autovetor de $\hat{A}$ com autovalor a_i,*

$$p(a_i, \psi) = |\langle a_i|\psi\rangle|^2,$$

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle.$$

Postulado 3 (Redução do pacote de onda) *Se numa medida do observável $\hat{A}$ acharmos o valor a_i, o sistema muda de um modo abrupto para o auto-estado de $\hat{A}$ com esse autovalor.*
Caso particular: *se o sistema está num auto-estado do observável $\hat{A}$ de autovalor a_i, numa medida desse observável acharemos a_i com certeza e o estado do sistema não muda.*

2 Espaço dos vetores de estado

Vamos retomar o enunciado do postulado 1.

O estado do sistema é representado por um vetor num espaço vetorial complexo munido de um produto escalar hermiteano, o espaço de vetores de estado.
Observação sobre notação: vamos adotar uma notação para os vetores de estado devido a Dirac, $|\alpha\rangle$, onde α é o rótulo identificador do vetor de estado.

Um espaço vetorial consiste de um conjunto de vetores, $(|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, \ldots)$, e um conjunto de escalares $(a, b, c, \ldots)$ onde estão definidas duas operações, adição de vetores e multiplicação por um escalar.

- **Adição de vetores:** A soma de dois vetores é outro vetor,

  $$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle.$$

  A adição de dois vetores é *comutativa*,

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

e *associativa*,

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

Existe um vetor nulo $|\otimes\rangle$ tal que

$$|\alpha\rangle + |\otimes\rangle = |\alpha\rangle$$

para qualquer $|\alpha\rangle$.
Para qualquer vetor $|\alpha\rangle$, existe um vetor que é o seu inverso tal que

$$|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle = |\otimes\rangle.$$

- **Multiplicação por um escalar:** A multiplicação de um vetor por um escalar é outro vetor,

$$a|\alpha\rangle = |\gamma\rangle.$$

A multiplicação por um escalar é *distributiva* com respeito à adição de vetores,

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

e com respeito à adição de escalares,

$$(a + b)|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle + b|\alpha\rangle.$$

É *associativa* com respeito à multiplicação de escalares,

$$a(b|\alpha\rangle) = (ab)|\alpha\rangle.$$

2.1 Produto Escalar

O espaço de vetores de estado é munido de um produto escalar hermiteano.
O produto escalar é uma operação que associa a todo par de vetores,$|\alpha\rangle, |\beta\rangle$, um número complexo denotado pelo símbolo $\langle\beta|\alpha\rangle$, satisfazendo as seguintes propiedades :
a) $\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$
b) $\langle\alpha|(|\beta\rangle + |\gamma\rangle) = \langle\alpha|\beta\rangle + \langle\alpha|\gamma\rangle$
c) $\langle\alpha|c\beta\rangle = c\langle\alpha|\beta\rangle$
d) $\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\alpha|\alpha\rangle^* \geq 0, \langle\alpha|\alpha\rangle = 0$ se e somente se $|\alpha\rangle = |\otimes\rangle$
Das propiedades a) e c) segue que $\langle c\alpha|\beta\rangle = c^*\langle\alpha|\beta\rangle$
E das propiedades a) e b) segue que $(\langle b\beta| + \langle c\gamma)|\alpha\rangle = b^*\langle\beta|\alpha\rangle + c^*\langle\gamma|\alpha\rangle$

Exercício 1:
a) Deduza a **desigualdade de Schwarz**:

$$|\langle\alpha|\beta\rangle|^2 \leq \langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle.$$

b) Deduza a **desigualdade triangular**:

$$||\alpha + \beta|| \leq ||\alpha|| + ||\beta||$$

2.2 Base no espaço dos vetores de estado

Um dado vetor $|\chi\rangle$ é *linearmente independente* do conjunto de vetores $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle, \ldots$ se ele não pode ser escrito como uma combinação linear desses vetores,

$$|\chi\rangle \neq a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle + c|\gamma\rangle + \ldots$$

Um conjunto de vetores é linearmente independente se cada um deles é independente do resto. Um tal conjunto define uma *base* no espaço vetorial se qualquer vetor puder ser escrito como uma combinação linear dos vetores do conjunto ,

$$|\alpha\rangle = a_1|\phi_1\rangle + a_2|\phi_2\rangle + \ldots + a_n|\phi_n\rangle$$

O número de vetores da base define a dimensão do espaço vetorial.A dimensão pode ser finita, enumerável infinita, não-enumerável infinita.
A *norma* de um vetor é definida como:

$$||\alpha|| = \sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}.$$

Se $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ o vetor $|\alpha\rangle$ é normalizado. Se $\langle\alpha|\beta\rangle = 0$ os vetores são ortogonais. Numa base ortonormal os vetores da base são ortogonais e normalizados.

$$\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}$$

Com respeito a uma dada base, qualquer vetor pode ser expresso como uma combinação linear dos vetores da base,

$$|\alpha\rangle = \sum_k a_k|\phi_k\rangle.$$

Os coeficientes da expansão , a_k, que são as componentes do vetor $|\alpha\rangle$ na direção dos vetores da base,são dados pelo produto escalar do vetor $|\alpha\rangle$ com cada vetor da base,

$$a_k = \langle\phi_k|\alpha\rangle$$

Exercício 2: Mostre que $a_k = \langle\phi_k|\alpha\rangle$.

Veja que

$$\langle\phi_k|\alpha\rangle = \sum_i a_i\langle\phi_k|\phi_i\rangle = \sum_i a_i\delta_{ki} = a_k.$$

Assim, temos que

$$|\alpha\rangle = \sum_k |\phi_k\rangle\langle\phi_k|\alpha\rangle.$$

Exercício 3: Mostre que o produto escalar de dois vetores pode ser escrito em termos de suas componentes numa dada base ortonormal como

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \sum_i a_i^* b_i.$$

O dado é a expansão dos vetores $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ numa base ortonormal

$$|\alpha\rangle = \sum_i a_i|\phi_i\rangle$$

$$|\beta\rangle = \sum_i b_i|\phi_i\rangle$$

Calculando explicitamente o produto escalar:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \sum_i b_i\langle\alpha|\phi_i\rangle = \sum_i b_i\langle\phi_i|\alpha\rangle^*$$

e levando em conta que $\langle\phi_i|\alpha\rangle = a_i$ concluímos que:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \sum_i a_i^* b_i.$$

3 Operadores Lineares

Operadores são objetos que transformam um vetor em outro vetor,

$$\hat{T}|\alpha\rangle = |\hat{T}\alpha\rangle = |\beta\rangle.$$

Um operador é *linear* se vale a propriedade

$$\begin{aligned} \hat{T}(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) &= a\hat{T}|\alpha\rangle + b\hat{T}|\beta\rangle \\ &= a|\hat{T}\alpha\rangle + b|\hat{T}\beta\rangle \end{aligned}$$

para quaisquer vetores $|\alpha\rangle$ e $\beta\rangle$ e quaisquer escalares a e b.

A soma e o produto de operadores lineares pode ser definida de forma natural através das relações:

$$\begin{aligned} (\hat{X} + \hat{Y})|\alpha\rangle &= \hat{X}|\alpha\rangle + \hat{Y}|\alpha\rangle, \\ (\hat{X}\hat{Y})|\alpha\rangle &= \hat{X}(\hat{Y}|\alpha\rangle). \end{aligned}$$

A soma de operadores é *comutativa* e *associativa*:

$$\begin{aligned} \hat{X} + \hat{Y} &= \hat{Y} + \hat{X}, \\ \hat{X} + (\hat{Y} + \hat{Z}) &= (\hat{X} + \hat{Y}) + \hat{Z}. \end{aligned}$$

O produto de operadores em geral é *não-comutativo*

$$\hat{X}\hat{Y} \neq \hat{Y}\hat{X}$$

mas é *associativo*

$$\hat{X}(\hat{Y}\hat{Z}) = (\hat{X}\hat{Y})\hat{Z}.$$

A ação de um operador em qualquer vetor $|\alpha\rangle$ está determinada se sabemos sua ação nos vetores de uma base no espaço dos vetores de estado:

$$\begin{aligned} \hat{T}|\phi_1\rangle &= T_{11}|\phi_1\rangle + T_{22}|\phi_2\rangle + \ldots + T_{n1}|\phi_n\rangle \\ &\vdots \\ \hat{T}|\phi_n\rangle &= T_{1n}|\phi_1\rangle + T_{2n}|\phi_2\rangle + \ldots + T_{nn}|\phi_n\rangle, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\hat{T}|\phi_i\rangle = \sum_j |\phi_j\rangle T_{ji}$$

onde

$$T_{ji} = \langle\phi_j|\hat{T}|\phi_i\rangle.$$

Se $|\alpha'\rangle$ é o vetor de estado transformado pela ação do operador $\hat{T}$ no vetor $|\alpha\rangle$

$$|\alpha'\rangle = \hat{T}|\alpha\rangle$$

vamos mostrar que os T_{ij} relaciona os coeficientes da expansão desses vetores na base $\{|\phi_i\rangle\}$.

$$|\alpha\rangle = \sum_i a_i|\phi_i\rangle$$

$$|\alpha'\rangle = \sum_i a'_i|\phi_i\rangle.$$

Veja que

$$\hat{T}|\alpha\rangle = \sum_i a_i \hat{T}|\phi_i\rangle = \sum_{i,j} |\phi_j\rangle T_{ji} a_i$$

Comparando

$$|\alpha'\rangle = \sum_j a'_j |\phi_j\rangle = \sum_{i,j} |\phi_j\rangle T_{ji} a_i.$$

temos que

$$a'_j = \sum_i T_{ji} a_i.$$

ou, em forma matricial,

$$a' = Ta$$

Assim vemos que a matriz T transforma um vetor de componentes $(a_1, a_2, \ldots)$ num de componentes $(a'_1, a'_2, \ldots)$. Concluindo,fixamos os vetores dando os coeficientes de sua expansão numa base ortonormal.No caso de operadores, determinando sua ação nos vetores de uma base ortonormal.
Formalizando as observações acima vamos associar a cada vetor $|\alpha\rangle$ uma matriz coluna cujos elementos são o conjunto ordenado dos coeficientes da expansão de $|\alpha\rangle$ numa dada base ortonormal , $|\phi_i\rangle$. Essa matriz coluna é a representação do vetor $|\alpha\rangle$ na base $|\phi_i\rangle$.
Do mesmo modo, a cada operador vamos associar uma matriz cujos elementos são determinados pela ação do operador nos vetores de uma dada base ortonormal.Essa matriz é a representação do operador na base $|\phi_i\rangle$.
Assim, dada uma base, temos:

$$|\alpha\rangle \leftrightarrow \alpha^T = (a_1, a_2, \ldots, a_n),$$

e

$$\hat{T} \longleftrightarrow T = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & \cdots & T_{1n} \\ T_{21} & T_{22} & \cdots & T_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{1n} & T_{2n} & \cdots & T_{nn} \end{pmatrix}.$$

Exercício 4: Seja $\hat{Z}$ o produto de dois operadores

$$\hat{Z} = \hat{Y}\hat{X}$$

Mostre que a matriz que representa $\hat{Z}$ numa dada base ortonormal,é o produto das matrizes que representam $\hat{X} e \hat{Y}$ nessa mesma base.

Seja

$$\hat{X}|\phi_j\rangle = \sum_i |\phi_i\rangle X_{i,j}$$

$$\hat{Y}|\phi_j\rangle = \sum_i |\phi_i\rangle Y_{i,j}$$

Então

$$\hat{X}|\phi_j\rangle = \sum_i |\phi_i\rangle X_{i,j}$$

e

$$\hat{Y}\hat{X}|\phi_j\rangle = \sum_i \hat{Y}|\phi_i\rangle X_{i,j} = \sum_{i,k} |\phi_k\rangle Y_{k,i} X_{i,j}$$

Mas,

$$\hat{Z}|\phi_i\rangle = \sum_k |\phi_k\rangle Z_{k,i}$$

Comparando , temos que,

$$Z_{k,i} = \sum_j Y_{k,j} X_{j,I}$$

ou

$$Z = YX$$

3.1 Operadores hermiteanos. Operadores unitários

Na formulação da Mecânica Quântica se destacam duas classes de operadores lineares, operadores hermiteanos e operadores unitários. Para estabelecer as propriedades desses operadores, vamos associar a cada operador $\hat{T}$, um outro operador $\hat{T}^\dagger$, denominado de operador hermiteano conjugado de $\hat{T}$, onde $\hat{T}^\dagger$ é definido pela relação,

$$\langle\alpha|\hat{T}^\dagger|\beta\rangle = \langle\beta|\hat{T}|\alpha\rangle^*.$$

Como consequência dessa relação, a matriz que representa $\hat{T}^\dagger$ numa dada base é a transposta complexa conjugada da matriz que representa $\hat{T}$,

$$T^\dagger_{ij} = T^*_{ji}.$$

Em outras palavras a matriz que representa $\hat{T}^\dagger$ é a matriz hermiteana conjugada da matriz que representa $\hat{T}$.

Operadores hermiteanos são iguais aos seus hermiteanos conjugados

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

Nesse caso a matriz que representa $\hat{T}$ numa dada base é uma matriz hermiteana. Uma matriz hermiteana é igual a sua hermiteana conjugada

$$T_{ij} = T^*_{ji}.$$

Quando existe, o operador inverso do operador $\hat{U}$, $\hat{U}^{-1}$, é definido pela relação

$$\hat{U}\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{-1}\hat{U} = \hat{1}$$

onde $\hat{1}$ é o operador unidade. Consequentemente as matrizes que representam esses operadores satisfazem à relação

$$UU^{-1} = U^{-1}U = 1$$

onde 1 é a matriz unidade.

Um operador é unitário se o seu inverso é igual ao seu hermiteano conjugado

$$\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$$

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger == \hat{1}.$$

Matrizes cujas inversas são iguais as suas hermiteanas conjugadas são chamadas de matrizes unitárias.

3.2 Mudança de base

Dado um vetor e um operador linear definidos no espaço de vetores de estado, as componentes do vetor e os elementos da matriz que representa o operador linear dependem da escolha da base. Então podemos perguntar como esses números mudam quando consideramos bases diferentes.

Para responder essas questões considere duas bases ortonormais no espaço de vetores de estado: $\{|\psi_i\rangle\}$ e $\{|\phi_i\rangle\}$,

$$\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij},$$

$$\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}.$$

Os vetores das duas bases estão relacionados por uma transformação linear

$$|\psi_i\rangle = \hat{S}|\phi_i\rangle = \sum_j |\phi_j\rangle S_{ji}$$

onde

$$S_{ji} = \langle\phi_j|\psi_i\rangle = \langle\phi_j|\hat{S}|\phi_i\rangle$$

$\hat{S}$ é um operador unitário. Para mostrar essa propriedade vamos calcular $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$:

$$\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij} = \sum_k \langle\psi_i|\phi_k\rangle S_{kj}.$$

Mas

$$\langle\phi_k|\psi_i\rangle = \sum_j \langle\phi_k|\phi_j\rangle S_{ji} = S_{ki}.$$

Como $\langle\psi_i|\phi_k\rangle = \langle\phi_k|\psi_i\rangle^* = S^*_{ki}$ temos que

$$\delta_{ij} = \sum_k S^*_{ki} S_{kj} = \sum_k (S^\dagger)_{ik} S_{kj}$$

ou

$$S^\dagger S = 1$$

garantindo que S é uma matriz unitária. Como a representação de um operador unitário é uma matriz unitária concluímos que o operador que relaciona os vetores de duas bases distintas é um operador unitário.
Note que o fato da transformação ser unitária é uma consequência direta dela ser entre bases ortonormais.

Para responder a pergunta de como as componentes da expansão de um vetor de estado se transformam considere a expansão de um vetor nas duas bases,

$$|\alpha\rangle = \sum_i a_i^{(\phi)}|\phi_i\rangle = \sum_i a_i^{(\psi)}|\psi_i\rangle$$

onde $a_i^{(\phi)}$ significa o coeficiente da expansão de $|\alpha\rangle$ na base $\{|\phi_i\rangle\}$, analogamente nos outros casos.

Para determinar como os coeficientes se transformam considere os passos explicitados abaixo

$$a_i^{(\psi)} = \langle\psi_i|\alpha\rangle = \sum_j \langle\psi_i|\phi_j\rangle a_j^{(\phi)} = \sum_j \langle\phi_j|\psi_i\rangle^* a_j^{(\phi)} = \sum_j S^*_{ji} a_j^{(\phi)}$$

mostrando que

$$a_i^{(\psi)} = \sum_j (S^\dagger)_{ij} a_j^{(\phi)}$$

ou na forma matricial

$$a^{(\psi)} = S^\dagger a^{(\phi)}.$$

A questão agora é como a matriz que representa um operador linear é modificada pela mudança de base. Para isto considere a representação de $\hat{T}$ nas duas bases

$$\hat{T}|\psi_i\rangle = \sum_j |\psi_j\rangle T_{ji}^{(\psi)}$$

e

$$\hat{T}|\phi_i\rangle = \sum_j |\phi_j\rangle T_{ji}^{(\phi)}.$$

Os passos para determinar como as matrizes se transformam são os seguintes

$$\begin{aligned} T_{ji}^{(\psi)} &= \langle\psi_j|\hat{T}|\psi_i\rangle = \sum_k \langle\psi_j|\hat{T}|\phi_k\rangle S_{ki} = \sum_{k,l} \langle\psi_j|\phi_l\rangle T_{lk}^{(\phi)} S_{ki} \\ &= \sum_{k,l} \langle\phi_l|\psi_j\rangle^* T_{lk}^{(\phi)} S_{ki} = \sum_{k,l} S_{lj}^* T_{lk}^{(\phi)} S_{ki}. \end{aligned}$$

Após todos esses passos vemos que

$$T_{ji}^{(\psi)} = \sum_{k,l} S_{jl}^{\dagger} T_{lk}^{(\phi)} S_{ki}$$

ou, em termos matriciais

$$T^{(\psi)} = S^{\dagger} T^{(\phi)} S$$

indicando que as matrizes que representam o operador $\hat{T}$ estão relacionadas por uma transformação unitária.

4 Autovetores e autovalores de um operador hermiteano

A equação de autovalores para um operador $\hat{T}$ é dada por:

$$\hat{T}|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle$$

onde $|\alpha\rangle$ é o autovetor de $\hat{T}$ e λ o corespondente autovalor.
Nesta seção vamos investigar as propiedades da equação de autovalores quando $\hat{T}$ é um operador hermiteano. Um operador *hermiteano* é igual ao seu hermiteano conjugado, $\hat{T}^{\dagger} = \hat{T}$. Como consequência dessa propiedade a matriz que representa um operador hermiteano numa dada base é uma matriz hermiteana $T_{ij} = T_{ji}^*$.

4.1 Propriedades

1. *Os autovalores de um operador hermiteano são reais.*
   Prova: Seja λ um autovalor de $\hat{T}$,

   $$\hat{T}|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle.$$

   Então,

   $$\langle\alpha|\hat{T}|\alpha\rangle = \lambda\langle\alpha|\alpha\rangle$$

   Como $\hat{T}$ é um operador hermiteano, vale as relações mostradas abaixo :

   $$\langle\alpha|\hat{T}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{T}^{\dagger}|\alpha\rangle^* = \langle\alpha|\hat{T}|\alpha\rangle^* = \lambda^*\langle\alpha|\alpha\rangle$$

   Igualando , temos que

   $$(\lambda - \lambda^*)\langle\alpha|\alpha\rangle = 0.$$

   Como o autovetor tem norma não nula, $\langle\alpha|\alpha\rangle \neq 0$, concluímos que $\lambda = \lambda^*$,isto é, λ é real.

2. *Autovetores com autovalores distintos são ortogonais.*
   Prova: Sejam λ_1 e λ_2 dois autovalores distintos de $\hat{T}$,$\lambda_1 \neq \lambda_2$, ou seja,

   $$\begin{aligned} \hat{T}|\alpha_1\rangle &= \lambda_1|\alpha_1\rangle \\ \hat{T}|\alpha_2\rangle &= \lambda_2|\alpha_2\rangle. \end{aligned}$$

   Então

   $$\langle\alpha_2|\hat{T}|\alpha_1\rangle = \lambda_1\langle\alpha_2|\alpha_1\rangle$$

   Usando o fato de $\hat{T}$ ser um operador hermiteano para calcular esse mesmo elemento de matriz, achamos que

   $$\langle\alpha_2|\hat{T}|\alpha_1\rangle = \langle\alpha_1|\hat{T}^{\dagger}|\alpha_2\rangle^* = \langle\alpha_1|\hat{T}|\alpha_2\rangle^* = \lambda_2\langle\alpha_1|\alpha_2\rangle^* = \lambda_2\langle\alpha_2|\alpha_1\rangle$$

Igualando ,temos que

$$(\lambda_2 - \lambda_1)\langle\alpha_2|\alpha_1\rangle = 0$$

Como$\lambda_1 \neq \lambda_2$concluimos que os autovetores são ortogonais,

$$\langle\alpha_2|\alpha_1\rangle = 0$$

3. Resolução da equação de autovalores.
   Para resolver a equação de autovalores

   $$\hat{T}|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle.$$

   temos que determinar a representação do operador hermiteano numa dada base $\{|e_i\rangle\}$

   $$\hat{T}|e_i\rangle = \sum_j T_{ji}|e_j\rangle,$$

   com

   $$T_{ji} = \langle e_j|\hat{T}|e_i\rangle$$

   Expandindo os autovetores nessa mesma base , $\{|e_i\rangle\}$,

   $$|\alpha\rangle = \sum_i c_i|e_i\rangle,$$

   podemos calcular facilmente

   $$\hat{T}|\alpha\rangle = \sum_i c_i\hat{T}|e_i\rangle = \sum_{i,j} c_iT_{ji}|e_j\rangle$$

   e

   $$\lambda|\alpha\rangle = \sum_j \lambda c_j|e_j\rangle.$$

   Igualando, vemos que a equação de autovalores fica igual a,

   $$\sum_i T_{ji}c_i = \lambda c_j$$

   ou, na forma matricial

   $$Tc = \lambda c.$$

   Assim reduzimos o problema de achar os autovalores e autovetores de um operador hermiteano ao problema de achar os autovalores e autovetores de uma matriz hermiteana, a representação do operador numa dada base. Os autovalores dessa matriz são os autovalores do operador e os autovetores são as componentes da expansão do autovetor nessa mesma base .

4. Calculo dos autovalores. Equação característica.
   A equação de autovalores é um sistema de n equações lineares homogêneas , acopladas

   $$\sum_i (T_{ji} - \delta_{ji})c_i = 0$$

   que tem solução somente se o determinante das incognitas é nulo

   $$det(T - \lambda 1) = 0$$

   onde 1 é a matriz unidade de ordem n .
   Calculando o determinante,chegamos numa equação algébrica de ordem n em λ, chamada de equação característica para os autovalores.O fato da matriz ser hermiteana garante que ela tem n raizes reais incluindo a multiplicidade.Para cada raiz,resolvemos o sistema de equações lineares acopladas para achar as componentes dos autovetores.

5. Os autovetores de um operador hermiteano formam uma base no espaço dos vetores de estado. Devemos distinguir dois casos :
Caso (i): Os autovalores são distintos. Nesse caso vamos destacar duas propiedades.Uma, que os autovetores são ortogonais.A outra que, nesse caso, existe uma relação bi-unívoca entre autovetor e autovalor , o que permite rotular o autovetor pelo correspondente autovalor,

$$\hat{T}|\lambda_i\rangle = \lambda_i|\lambda_i\rangle,$$

$$\langle\lambda_j|\lambda_i\rangle = \delta_{ji}$$

Caso ii: Existe degenerescência
A degenerescência ocorre quando existe raízes com multiplicidade diferente de 1, por exemplo, o autovalor λ_i tem multiplicidade d_i , isto é ,o autovalor λ_i tem degenerescência igual a d_i.
O fato da matriz ser hermiteana garante que no subespaço degenerado existe d_i vetores linearmente independentes que podem ser ortogonalizados, por exemplo, pelo método de Gram-Schmidt.
Diferente do caso anterior,não existe uma relação bi-unívoca entre autovetor e autovalor , e precisamos outro rotulo para selecionar um entre os d_i autovetores degenerados. Um exemplo de uma possível escolha seria $\{|\lambda_i, \tau_{ik}\rangle\}$, $k = 1, \ldots, d_i$ com d_i sendo a ordem da degenerescência do autovalor λ_i

$$\hat{T}|\lambda_i, \tau_{ik}\rangle = \lambda_i|\lambda_i, \tau_{ik}\rangle$$

$$\langle\lambda_i, \tau_{ik}|\lambda_j, \tau_{jl}\rangle = \delta_{ij}\delta_{kl}.$$

6. Diagonalização
Uma vez resolvida a equação de autovalores,terminamos com duas bases no espaço dos vetores de estado:a base escolhida para resolver a equação de autovalores e a base dos autovetores do operador hermiteano $\hat{T}$.Como discutimos anteriormente, as duas bases estão relacionadas por uma transformação unitária,

$$|\alpha_k\rangle = \hat{S}|e_k\rangle$$

onde o índice k estabelece uma ordenação do conjunto dos autovetores de $\hat{T}$.
Os elementos da matriz S são determinados pelas componentes da expansão dos autovetores na base $\{|e_i\rangle\}$,

$$|\alpha_k\rangle = \sum_j |e_j\rangle S_{jk}$$

$$|\alpha_k\rangle = \sum_j |e_j\rangle c_j^{(k))}$$

Comparando, vemos que os elementos da k-ésima coluna da matriz S são as componentes da expansão do k-ésimo autovetor na base $\{|e_j\rangle\}$, $S_{jk} = c_j^{(k)}$. S gera uma transformaçãounitária que diagonaliza T:

$$\lambda = S^\dagger T S$$

onde λ é uma matriz diagonal cujos elementos da diagonal são os autovalores de $\hat{T}$, $\lambda_{ij} = \lambda_i\delta_{ij}$.

5 Equação de Schrödinger dependente do tempo. Estados estacionários.

(a) O vetor de estado do sistema no instante t é determinado resolvendo-se a equação de Schrödinger dependente do tempo:

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

dado o vetor de estado no instante inicial $|\psi(t_0)\rangle$, onde $\hat{H}$ é o operador hamiltoniana do sistema.

(b) Os estados estacionários são caracterizados pela propriedade da dependência temporal de $|\psi(t)\rangle$ ser da forma

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}|\psi\rangle$$

A condição para que $|\psi(t)\rangle$ seja uma solução da equação de Schrödinger dependente do tempo é $|\psi\rangle$ ser uma solução da equação de Schrödinger independente do tempo

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle.$$

(c) A equação de Schrödinger independente do tempo é uma equação de autovalores para o operador hamiltoniana $\hat{H}$,o estado estacionário $|\psi\rangle$ é o autovetor e E é o autovalor

(d) Os autovalores de $\hat{H}$ são os níveis de energia do sistema.

(e) A equação de autovalores fornece uma coleção de soluções $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \ldots, |\psi_n\rangle$ associada as energias $E_1, E_2, \ldots, E_n$ caso exista,incluindo a multiplicidade. Essa coleção de autovetores de $\hat{H}$ formam uma base, no espaço dos vetores de estado.

(f) A solução mais geral da equação de Schrödinger dependente do tempo pode ser escrita como uma combinação linear dos estados estacionários

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}|\psi_n\rangle$$

onde os coeficientes c_n são os coeficientes da expansão do estado inicial na base de estados estacionários

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_n c_n|\psi_n\rangle$$

com

$$c_n = \langle\psi_n|\psi(t_0)\rangle.$$

6 Princípio da incerteza

6.1 Valor médio e dispersão das medidas de um observável

Valor médio

Se o sistema está no estado $|\psi\rangle$, a probabilidade de numa medida do observável $\hat{A}$ acharmos o valor a_i, é dado pelo módulo ao quadrado do produto escalar de $|\psi\rangle$ com o autovetor de $\hat{A}$ com autovalor a_1,

$$p(a_i, \psi) = |\langle a_i|\psi\rangle|^2.$$

Por definição o valor médio das medidas de um observável $\hat{A}$ se o sistema está no estado $|\psi\rangle$ é dado por

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_i a_i p(a_i, \psi) = \sum_i a_i |\langle a_i|\psi\rangle|^2.$$

Como os autovetores de $\hat{A}$ formam uma base, $|\psi\rangle$ pode ser escrito como uma combinação linear dos autovetores de $\hat{A}$,

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i|a_i\rangle$$

com

$$c_i = \langle a_i|\psi\rangle.$$

Então

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_i c_i\hat{A}|a_i\rangle = \sum_i a_i\langle a_i|\psi\rangle|a_i\rangle$$

e

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_i a_i \langle a_i|\psi\rangle\langle\psi|a_i\rangle = \sum_i a_i \langle a_i|\psi\rangle\langle a_i|\psi\rangle^* = \sum_i a_i |\langle a_i|\psi\rangle|^2.$$

Assim, o valor médio das medidas de $\hat{A}$, se o sistema está no estado $|\psi\rangle$ é igual a

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle.$$

Dispersão das medidas de $\hat{A}$

Por definição a dispersão das medidas de $\hat{A}$ é dada por

$$\sigma_A^2 = \sum_i (a_i - \langle\hat{A}\rangle)^2 p(a_i, \psi).$$

Como

$$(a_i - \langle\hat{A}\rangle)^2 = a_i^2 - 2a_i\langle\hat{A}\rangle + \langle\hat{A}\rangle^2$$

a dispersão fica igual a

$$\sigma_A^2 = \sum_i (a_i^2 - 2a_i\langle\hat{A}\rangle + \langle\hat{A}\rangle^2) p(a_i, \psi).$$

Dado que

$$\sum_i p(a_i, \psi) = \langle\psi|\psi\rangle = 1,$$

$$\sum_i a_i p(a_i, \psi) = \langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle,$$

$$\sum_i a_i^2 p(a_i, \psi) = \langle\hat{A}^2\rangle = \langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle$$

onde a última relação é facilmente deduzida se lembrarmos que

$$\hat{A}^2|a_i\rangle = a_i^2|a_i\rangle.$$

chegamos a concluão que a dispersão é dada pelo valor médio de $\hat{A}^2$ menos o valor médio de $\hat{A}$ ao quadrado

$$\sigma_A^2 = \langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle^2$$

ou uma expressão equivalente

$$\sigma_A^2 = \langle\psi|(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2|\psi\rangle.$$

A igualdade dessas duas expressões segue imediatamente de:

$$(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2 = \hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle\hat{A}\rangle + \langle\hat{A}\rangle^2.$$

Como o valor médio de um operador hermiteano é um número real,

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle^* = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle^*,$$

podemos concluir que a última expressão de σ_A^2 é a norma ao quadrado do vetor de estado $|\alpha\rangle = (\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)|\psi\rangle$:

$$\sigma_A^2 = \langle\alpha|\alpha\rangle.$$

Vemos então que a dispersão se anula se e somente se $|\alpha\rangle$ é o vetor nulo, $|\alpha\rangle = |\otimes\rangle$,

$$(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)|\psi\rangle = |\otimes\rangle$$

ou

$$\hat{A}|\psi\rangle = \langle\hat{A}\rangle|\psi\rangle$$

isto é, $|\psi\rangle$ é um autovetor de $\hat{A}$ com autovalor $\langle\hat{A}\rangle$.

6.2 Princípio da incerteza

Vamos demonstrar que se $\hat{A}$ e $\hat{B}$ são dois observáveis vale a relação de incerteza,

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \frac{1}{4}|\langle\psi|[\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle|^2$$

onde$[\hat{A},\hat{B}]$ é o comutador de $\hat{A}$ e $\hat{B}$:

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

Observáveis para os quais $[\hat{A},\hat{B}] \neq 0$ são chamados de observáveis incompatíveis.Vemos então que, como existe um limite inferior para o produto das dispersões, elas não podem ser reduzidas independentemente.Por exemplo, se $\hat{A},\hat{B}$ é um par de observáveis incompatíveis, quão mais precisa são as medidas de $\hat{A}$ mais imprecisa são as de $\hat{B}$. Por outro lado,observáveis para os quais $[\hat{A},\hat{B}] = 0$ são chamados de observáveis compatíveis.Nesse caso não existe nenhuma restrição quanto a precisão das medidas desses dois observáveis.

6.3 Prova do princípio da incerteza

Para provar o princípio da incerteza vamos enunciar três lemas:

Lema 1 *Desigualdade de Schwarz:*

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \geq |\langle\alpha|\beta\rangle|^2.$$

Prova: Seja $|\gamma\rangle = |\alpha\rangle + \lambda|\beta\rangle$. Então a norma de $|\gamma\rangle$ é dada por :

$$\langle\gamma|\gamma\rangle = \langle\alpha|\alpha\rangle + \lambda\langle\alpha|\beta\rangle + \lambda^*\langle\beta|\alpha\rangle + |\lambda|^2\langle\beta|\beta\rangle.$$

Se $\lambda = -\frac{\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}$ a norma de$|\gamma\rangle$ fica igual a,

$$\begin{aligned}\langle\gamma|\gamma\rangle &= \langle\alpha|\alpha\rangle - \frac{|\langle\alpha|\beta\rangle|^2}{\langle\beta|\beta\rangle}\\ &= \frac{\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle - |\langle\alpha|\beta\rangle|^2}{\langle\beta|\beta\rangle} \geq 0\end{aligned}$$

portanto

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \geq |\langle\alpha|\beta\rangle|^2.$$

A igualdade ocorre se $|\gamma\rangle = |\otimes\rangle$ ou $|\alpha\rangle = -\lambda|\beta\rangle$.

Lema 2 *O valor médio de um operador hermiteano é real.*

Prova:

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle^* = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle^*$$

Lema 3 *O valor médio de um operador anti-hermiteano é um imaginário puro.*

Um operador anti-hermiteano é igual a menos o seu hermiteano conjugado,$\hat{A}^\dagger = -\hat{A}$
Prova:

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle^* = -\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle^*$$

Vamos começar a demonstração do princípio da incerteza definindo dois vetores:

$$\begin{aligned}|\alpha\rangle &= \Delta\hat{A}|\psi\rangle\\ |\beta\rangle &= \Delta\hat{B}|\psi\rangle\end{aligned}$$

onde, $\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle$ e $\Delta\hat{B} = \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle$são operadores hermiteanos , veja Lema 2. Pelo exercício 5 sabemos que a norma ao quadrado desses vetores é igual a dispersão

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\psi|(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2|\psi\rangle = \sigma_A^2$$

e

$$\langle\beta|\beta\rangle = \langle\psi|(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)^2|\psi\rangle = \sigma_B^2.$$

No mesmo exercício 5 mostramos que

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\psi\rangle.$$

O produto $\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}$ pode ser escrito da seguinte forma

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

onde

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

é o comutador de $\Delta\hat{A}$ e $\Delta\hat{B}$ e

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

é o anti-comutador de $\Delta\hat{A}$ e $\Delta\hat{B}$.
Agora, vamos enunciar duas propiedades que usaremos na demonstração.
i) O comutador de dois operadores hermiteanos é anti-hermiteano.
Sejam $\hat{C}$ e $\hat{D}$ dois operadores hermiteanos.

$$[\hat{C}, \hat{D}]^\dagger = \hat{D}^\dagger\hat{C}^\dagger - \hat{C}^\dagger\hat{D}^\dagger = \hat{D}\hat{C} - \hat{C}\hat{D} = -[\hat{C}, \hat{D}].$$

ii) O anti-comutador de dois operadores hermiteanos é hermiteano.
Sejam $\hat{C}$ e $\hat{D}$ dois operadores hermiteanos.

$$\{\hat{C}, \hat{D}\}^\dagger = \hat{D}^\dagger\hat{C}^\dagger + \hat{C}^\dagger\hat{D}^\dagger = \hat{D}\hat{C} + \hat{C}\hat{D} = \{\hat{C}, \hat{D}\}.$$

Os passos para deduzir o princípio da incerteza estão na ordem das propiedades discutidas acima.
Da desigualdade de Schwarz temos que

$$\begin{aligned}
\sigma_A^2\sigma_B^2 &\geq |\langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\psi\rangle|^2 \\
&\geq \frac{1}{4}|\langle\psi|\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}|\psi\rangle + \langle\psi|[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]|\psi\rangle|^2 \\
&\geq \frac{1}{4}\left(|\langle\psi|\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}|\psi\rangle|^2 + |\langle\psi|[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]|\psi\rangle|^2\right) \\
&\geq \frac{1}{4}|\langle\psi|[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]|\psi\rangle|^2.
\end{aligned}$$

Como,

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

deduzimos o princípio da incerteza:

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \frac{1}{4}|\langle\psi|[\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle|^2$$

Estado de incerteza mínima.
Naturalmente,o princípio da incerteza depende de $|\psi\rangle$ Desse modo,dado dois observáveis incompatíveis,podemos achar o estado de incerteza mínima,para o qual a desigualdade se torna igualdade.
A igualdade ocorre quando,

$$\langle\psi|\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}|\psi\rangle = 0$$

$$\Delta\hat{A}|\psi\rangle = -\lambda\Delta\hat{B}|\psi\rangle$$

A primeira das duas equações acima,diz que o valor médio do anti-comutador é nulo.Vamos examinar as consequências dessa restrição.Usando a segunda das duas equações , podemos mostrar que:

$$\langle\psi|\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}|\psi\rangle = -\lambda\langle\psi|\Delta\hat{B}^2|\psi\rangle$$
$$\langle\psi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\psi\rangle = \langle\psi|\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}|\psi\rangle^* = -\lambda^*\langle\psi|\Delta\hat{B}^2|\psi\rangle$$

O anti-comutador é nulo se

$$(\lambda^* + \lambda)\langle\psi|\Delta\hat{B}^2|\psi\rangle = (\lambda^* + \lambda)\sigma_B^2 = 0$$

Desse modo, concluímos que λ é um número imaginário puro. Usando as relações acima podemos determinar o valor de λ :

$$\langle\psi|[\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle = \langle\psi|[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}]|\psi\rangle = (\lambda - \lambda^*)\sigma_B^2$$

Como $\lambda^* = -\lambda$,temos que λ é dada por:

$$\lambda = \frac{\langle\psi|[\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle}{2\sigma_B^2}$$

Resumindo, o estado de incerteza mínima satisfaz a equação

$$(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)|\psi\rangle = -\lambda(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)|\psi\rangle.$$

com λ calculado acima.
Princípio da incerteza de Heisenberg.
Os observáveis no princípio da incerteza de Heisenberg , são os operadores posição e momento, $\hat{x},\hat{p}$ respectivamente.Como, $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$, o princípio da incerteza de Heisenberg é dado por:

$$\sigma_x^2\sigma_p^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Note que, nesse caso, o limite inferior não depende do estado.
Exercício 5.
Mostre que, se $\hat{X}$ e $\hat{Y}$ são operadores hermiteanos vale a identidade,

$$\langle\gamma|\delta\rangle = \langle\alpha|\hat{X}\hat{Y}|\beta\rangle$$

onde,

$$|\gamma\rangle = \hat{X}|\alpha\rangle$$
$$|\delta\rangle = \hat{Y}|\beta\rangle$$

6.4 Princípio da incerteza energia-tempo

Vamos examinar o princípio da incerteza no caso particular onde $|\psi\rangle$ é o vetor de estado do sistema no instante t e a hamiltoniana um dos observáveis,

$$\begin{array}{ccc} |\psi\rangle & \rightarrow & |\psi(t)\rangle \\ \hat{A} & \rightarrow & \hat{A} \\ \hat{B} & \rightarrow & \hat{H} \end{array}$$

Pelo princípio da incerteza temos que:

$$\sigma_A^2\sigma_H^2 \geq \frac{1}{4}|\langle\psi(t)|[\hat{A},\hat{H}]|\psi(t)\rangle|^2.$$

com as dispersões de $\hat{A}$ e $\hat{H}$ iguais a,

$$\sigma_A^2 = \langle\psi(t)|(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|\hat{A}^2|\psi(t)\rangle - \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle^2$$

$$\sigma_H^2 = \langle\psi(t)|(\hat{H} - \langle\hat{H}\rangle)^2|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|\hat{H}^2|\psi(t)\rangle - \langle\psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle^2$$

Como, pelo exercício seis,vale a identidade,

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

o princípio da incerteza fica igual a,

$$\sigma_A^2\sigma_H^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}\left|\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt}\right|^2$$

Essa expressão sugere a introdução de um tempo característico dado por,

$$\tau_A = \frac{\sigma_A}{\left|\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt}\right|}$$

e reescrever a relação da incerteza como,

$$\sigma_H\tau_A \geq \frac{\hbar}{2}$$

A interpretação física de τ_Aé identifica-lo com o tempo necessário para que o valor médio do observável $\hat{A}$ mude de um valor igual ao seu desvio padrão. Em outras palavras, é um tempo característico para notarmos uma variação do sistema.
Qualitativamente, podemos destacar dois limites:
a) $\sigma_H \to 0$, $\tau_A \to \infty$, o sistema não muda.Estado estacionário.
b) $\sigma_H \to \infty$, $\tau_A \to 0$, vetor de estado com dispersão da energia grande, tempo de mudança pequeno.
Exercício 6 .
Mostre que ,

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

Sugestão:Use a expansão de $|\psi(t)\rangle$ na base de estados estacionários,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|\psi_n\rangle$$

com $c_n(t) = c_n(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$

7 Observáveis que têm um espectro contínuo

Até aqui consideramos observáveis cujo espectro era discreto. Contudo na Mecânica Quântica existem observáveis com um contínuo de possíveis valores. Por exemplo, a componente na direção z do operador momento, p_z, pode assumir qualquer valor real no intervalo entre $-\infty$ e ∞.

O tratamento rigoroso dos observáveis cujo espectro é contínuo é matematicamente complicado pelo fato de lidar com espaços vetoriais de dimensão infinita. Felizmente muitas das propriedades deduzida para operadores com espectro discreto podem ser generalizadas para operadores com espectro contínuo.

1. **Equação de autovalores.**
   a) Operador com espectro discreto:

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$$

$$\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}.$$

b) Operador com espectro contínuo:

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

Na generalização $|\xi'\rangle$ é um autovetor de $\hat{\xi}$ com autovalor ξ' cuja normalização é uma função delta de Dirac. Desse modo autovetores de um operador cujo espectro é contínuo não é normalizável. Na verdade observáveis cujo espectro é contínuo não têm autovetores mas como veremos adiante eles definem uma base no espaço de vetores de estado.

2. **Autovetores de um observável definem uma base no espaço de vetores de estado.**
a) Caso discreto:

$$|\alpha\rangle = \sum_i |a_i\rangle\langle\, a_i|\alpha\rangle.$$

b) Caso contínuo:

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi'|\xi'\rangle\langle\xi'|\alpha\rangle.$$

No caso discreto a cada estado $|\alpha\rangle$ associamos uma matriz coluna cujas componentes são os coeficientes da expansão de $|\alpha\rangle$ numa dada base

$$|\alpha\rangle \to (\langle a_1|\alpha\rangle, \langle a_2|\alpha\rangle, \ldots, \langle a_n|\alpha\rangle)^T.$$

No caso contínuo a cada estado $|\alpha\rangle$ associamos uma função $\langle\xi'|\alpha\rangle$:

$$|\alpha\rangle \to \langle\xi'|\alpha\rangle.$$

3. **Produto escalar de dois vetores de estado.**
a) Caso discreto:

$$|\alpha\rangle = \sum_i |a_i\rangle\langle\, a_i|\alpha\rangle \quad |\beta\rangle = \sum_i |a_i\rangle\langle\, a_i|\beta\rangle$$
$$\langle\alpha|\beta\rangle = \sum_i \langle\, a_i|\alpha\rangle^*\langle\, a_i|\beta\rangle.$$

b) Caso contínuo:

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi'|\xi'\rangle\langle\xi'|\alpha\rangle \quad |\beta\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi'|\xi'\rangle\langle\xi'|\beta\rangle$$
$$\langle\alpha|\beta\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi'\langle\xi'|\alpha\rangle^*\langle\xi'|\beta\rangle.$$

4. **Ação de operadores numa dada base.**
a) Caso discreto:

$$\hat{X}|a_i\rangle = \sum_j |a_j\rangle X_{ji}$$

b) Caso contínuo:

$$\hat{X}|\xi'\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi''|\xi''\rangle\langle\xi''|\hat{X}|\xi'\rangle.$$

$X_{ji} = \langle a_j|\hat{X}|a_i\rangle$, elemento ji da matriz que representa $\hat{X}$ na base $\{|a_i\rangle\}$.
$\langle\xi''|\hat{X}|\xi'\rangle$, função que representa $\hat{X}$ na base $\{|\xi'\rangle\}$.

7.1 Operador posição, $\hat{x}$.

a) Autovetores:

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

b) Função de onda:
Expandindo um vetor de onda $|\alpha\rangle$ na base dos autovetores do operador posição temos que

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

onde $\langle x'|\alpha\rangle$ é a *função de onda* do estado $|\alpha\rangle$

$$f_\alpha(x') = \langle x'|\alpha\rangle.$$

Generalizando o caso de observáveis com espectro discreto, para cada vetor de estado $|\alpha\rangle$ vamos associar uma função $f_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle$, a função de onda do estado $|\alpha\rangle$.
c) Produto escalar de dois vetores $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$.
Dado

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

podemos mostrar que o produto escalar dos dois vetores é dado pela integral

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' f_\alpha(x')^* f_\beta(x')$$

pois

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

Como a integral deve convergir devemos impor que a função de onda sejam de *quadrado integrável*,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx'|f_\alpha(x')|^2 < \infty.$$

Note que as funções de quadrado integrável satisfazem as propriedades exigidas de um espaço vetorial.

- **Operadores**

No espaço das funções de onda os operadores se comportam como transformações lineares quem levam uma função definida em $L_2(-\infty, +\infty)$ em outra função definida em $L_2(-\infty, +\infty)$. Exemplos são o operador posição e o operador momento.
a) Operador posição: Se

$$|\beta\rangle = \hat{x}|\alpha\rangle$$

então

$$f_\beta(x) = x f_\alpha(x).$$

b) Operador momento: Se

$$|\beta\rangle = \hat{p}|\alpha\rangle$$

então

$$f_\beta(x) = -i\hbar\frac{df_\alpha}{dx}(x).$$

- **Representação de operadores**

a) Caso discreto:

$$|\beta\rangle = \hat{T}|\alpha\rangle$$

Seja

$$|\alpha\rangle = \sum_i a_i|a_i\rangle = \sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\alpha\rangle$$

$$|\beta\rangle = \sum_i b_i|a_i\rangle = \sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\beta\rangle.$$

Então, como

$$\hat{T}|a_i\rangle = \sum_j |a_j\rangle T_{ji} = \sum_j |a_j\rangle\langle a_j|\hat{T}|a_i\rangle$$

é imediato que

$$b_i = \sum_j T_{ij}a_j.$$

b) Caso contínuo:

$$|\beta\rangle = \hat{T}|\alpha\rangle$$

Seja

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

$$|\beta\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx'|x'\rangle f_\beta(x')$$

de modo que

$$\begin{aligned}\hat{T}|\alpha\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\hat{T}|x'\rangle f_\alpha(x') \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} dx'dx''|x''\rangle\langle x''|\hat{T}|x'\rangle f_\alpha(x').\end{aligned}$$

Assim

$$\langle x|\hat{T}|\alpha\rangle = f_\beta(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\langle x|\hat{T}|x'\rangle f_\alpha(x')$$

e portanto

$$f_\beta(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\langle x|\hat{T}|x'\rangle f_\alpha(x').$$

$f_\alpha(x')$: representação do estado $|\alpha\rangle$ no espaço das posições.
$\langle x|\hat{T}|x'\rangle$: representação do operador $\hat{T}$ no espaço das posições.

Exemplos:

a) Operador posição: Se

$$|\beta\rangle = \hat{x}|\alpha\rangle$$

então

$$f_\beta(x') = x'f_\alpha(x').$$

Comparando com $f_\beta(x') = \int dx''\langle x'|\hat{x}|x''\rangle f_\alpha(x'')$ concluímos que

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

b) Operador momento: Se

$$|\beta\rangle = \hat{p}|\alpha\rangle$$

então

$$f_\beta(x') = -i\hbar\frac{df_\alpha}{dx'}(x').$$

Mas como $f_\beta(x') = \int dx''\langle x'|\hat{p}|x''\rangle f_\alpha(x'')$ concluímos que

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

- **Medida da posição**

Quando medimos a posição da partícula, o detector localiza a partícula num intervalo Δ em torno de um ponto x. Sendo mais específico, quando fazemos a medida de posição o estado muda abruptamente para um estado localizado na vizinhança do ponto x:

$$f_{\alpha_L}(x'') = \begin{cases} \frac{f_\alpha(x'')}{\left|\int_{x'-\frac{\Delta}{2}}^{x'+\frac{\Delta}{2}} |f_\alpha(x'')|^2 dx''\right|^{\frac{1}{2}}}, & \text{se } x' - \frac{\Delta}{2} < x'' < x' + \frac{\Delta}{2} \\ 0, & \text{nos outros casos.} \end{cases}$$

Interpretação: A probabilidade de achar a partícula no intervalo $x' - \frac{\Delta}{2} < x'' < x' + \frac{\Delta}{2}$ é

$$p(x' - \frac{\Delta}{2} < x'' < x' + \frac{\Delta}{2}) = \int_{x'-\frac{\Delta}{2}}^{x'+\frac{\Delta}{2}} |f_\alpha(x'')|^2 dx'' = |\langle\alpha_L|\alpha\rangle|^2$$

pois, como

$$|\alpha_L\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x''\rangle f_{\alpha_L}(x'')dx''$$

$$\langle\alpha|\alpha_L\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f_\alpha^*(x'')f_{\alpha_L}(x'')dx'' = \int_{x'-\frac{\Delta}{2}}^{x'+\frac{\Delta}{2}} |f_\alpha(x'')|^2 \frac{1}{\left|\int_{x'-\frac{\Delta}{2}}^{x'+\frac{\Delta}{2}} |f_\alpha(x'')|^2 dx''\right|^{\frac{1}{2}}} dx''.$$

Vemos que a medida da posição corta uma fatia da função de onda do sistema antes da medida.

Quando Δ tende a zero a probabilidade de encontrarmos a partícula no intervalo $\left(x' - \frac{\Delta}{2}, x' + \frac{\Delta}{2}\right)$ varia lentamente com Δ, onde o coeficiente é a densidade de probabilidade de acharmos a partícula no ponto x'. Como

$$p(x' - \frac{\Delta}{2} < x'' < x' + \frac{\Delta}{2}) = \int_{x'-\frac{\Delta}{2}}^{x'+\frac{\Delta}{2}} |f_\alpha(x'')|^2 dx''$$

temos que

$$\lim_{\Delta\to 0} p(x' - \frac{\Delta}{2} < x'' < x' + \frac{\Delta}{2}) = \frac{dp}{d\Delta}(\Delta = 0)\Delta$$

$$\frac{dp}{d\Delta} = |f_\alpha(x)|^2\Delta$$

mostrando que $|f_\alpha(x)|^2$ é a densidade de probabilidade de encontrar a partícula no ponto x.

7.2 Operador momento, $\hat{p}$

1. **Autovetores do operador momento**

$$\hat{p}|p'\rangle = p'|p'\rangle.$$

Em termos da função de onda

$$\langle x'|\hat{p}|p'\rangle = p'\langle x'|p'\rangle$$

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

$$f_{p'}(x') = \langle x'|p'\rangle = Ce^{\frac{i}{\hbar}p'x'}.$$

Normalização:

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

Veja que

$$\langle p''|p'\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*_{p''}(x')f_{p'}(x')dx' = |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(p''-p')x'}dx'.$$

Como $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx}dx = 2\pi\delta(k)$ vemos que

$$\langle p''|p'\rangle = |C|^2 2\pi\delta\left(\frac{p''-p'}{\hbar}\right) = |C|^2 2\pi\hbar\delta\left(p''-p'\right).$$

Com isto determinamos C,

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

e portanto

$$\langle x'|p'\rangle = f_{p'}(x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}p'x'}.$$

- **Função de onda no espaço dos momentos**

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp'|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle$$

onde $\langle p'|\alpha\rangle = f_\alpha(p')$ é a função de onda no espaço dos momentos.

$\rho(p,\alpha) = |f_\alpha(x)|^2$ é a densidade de probabilidade de numa medida do momento acharmos o valor p.

- **Relação entre as funções de onda**

Temos

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

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

com

$$f_\alpha(x') = \langle x'|\alpha\rangle, \quad f_\alpha(p') = \langle p'|\alpha\rangle.$$

Das relações acima podemos mostrar que

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

e

$$f_\alpha(p') = \int dx'\langle p'|x'\rangle f_\alpha(x').$$

A função que transforma as funções de onda do estado $|\alpha\rangle$ no espaço das posições e no espaço dos momentos é a função de onda dos autovetores do operador momento

$$f_\alpha(x') = \int \frac{dp'}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}p'x'}f_\alpha(p')$$

e

$$f_\alpha(p') = \int \frac{dx'}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}p'x'}f_\alpha(x').$$

Note que as funções de onda estão relacionadas por uma transformação de Fourier.

Exercício 1: *Pacote de incerteza mínima.*

No princípio da incerteza de Heisenberg os operadores incompatíveis são os operadores posição e momento, $\hat{x}$ e $\hat{p}$. Como $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$, o princípio da incerteza de Heisenberg é dado por:

$$\sigma_x^2\sigma_p^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

Identificando $\hat{A} = \hat{p}$ e $\hat{B} = \hat{x}$, o estado de incerteza mínima é determinado pela equação:

$$(\hat{p} - \langle\hat{p}\rangle)|\psi\rangle = -\lambda(\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle)|\psi\rangle$$

onde λ é um imaginário puro igual à

$$\lambda = -\frac{i\hbar}{2\sigma_x^2}.$$

Resolvendo a equação para a função de onda do estado de incerteza mínima, $|\psi\rangle$, chegamos na equação

$$-i\hbar\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial x}(x) = \langle\hat{p}\rangle\psi_\alpha(x) + \frac{i\hbar}{2\sigma_x^2}(x - \langle\hat{x}\rangle)\psi_\alpha(x)$$

ou

$$\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial x}(x) = \frac{i}{\hbar}\langle\hat{p}\rangle\psi_\alpha(x) - \frac{(x - \langle\hat{x}\rangle)}{2\sigma_x^2}\psi_\alpha(x)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\text{Ln}\psi_\alpha(x) = \frac{i}{\hbar}\langle\hat{p}\rangle - \frac{(x - \langle\hat{x}\rangle)}{2\sigma_x^2}$$

Obtemos

$$\psi_\alpha(x) = Ce^{-\frac{(x-\langle\hat{x}\rangle)^2}{4\sigma_x^2}}e^{\frac{i}{\hbar}\langle\hat{p}\rangle x}.$$

A condição de normalização determina o valor de C,

$$C = \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{\frac{1}{4}}}.$$

Desse modo concluímos que o estado de incerteza mínima é o *pacote gaussiano*

$$\psi_\alpha(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{(x-\langle\hat{x}\rangle)^2}{4\sigma_x^2}}e^{\frac{i}{\hbar}\langle\hat{p}\rangle x}.$$

Exercício 2: *Mostre que o operador de translação do sistema é*

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

Sejam dois vetores de estado relacionados por uma translação. Nesse caso as funções de onda do estado transladado e do estado original devem estar relacionados:

$$|\beta\rangle = \hat{T}(a)|\alpha\rangle$$

$$f_\beta(x) = f_\alpha(x - a)$$

onde a é a magnitude da translação.

A função de onda no espaço dos momentos do estado transladado é igual a

$$f_{\hat{T}\alpha}(p') = \langle p'|\hat{T}(a)|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{T}^\dagger(a)|p'\rangle^*.$$

Como

$$\hat{T}^\dagger(a)|p'\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}p'a}|p'\rangle$$

segue que

$$f_{\hat{T}\alpha}(p') = e^{-\frac{i}{\hbar}p'a}\langle p'|\alpha\rangle = f_\alpha(p')e^{-\frac{i}{\hbar}p'a}.$$

Sabemos que as funções de onda no espaço das posições e no espaço dos momentos estão relacionados por uma transformação de Fourier

$$\begin{aligned}
f_{\hat{T}\alpha}(x') &= \int \frac{dp'}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p'x'} f_{\hat{T}\alpha}(p') \\
&= \int \frac{dp'}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p'(x'-a)} f_\alpha(p') \\
&= f_\alpha(x'-a).
\end{aligned}$$

c.q.d.