

FI 001 – Mecânica Quântica I – Lista 2

Soluções

Questão 01 — Espectro de p , lema de Hadamard e evolução unitária

(P.8.2, P.8.4 e P.8.6, Messiah)

a) Espectro de p e a representação- p

Preliminares. Sejam q e p os observáveis canônicos de um sistema com análogo clássico em uma dimensão,

$$[q, p] = i\hbar \mathbb{1}.$$

“Ter análogo clássico” significa, seguindo Messiah, que toda grandeza dinâmica do sistema é função de q e p ; em linguagem de operadores, o par (q, p) é *irredutível*: todo operador que comuta simultaneamente com q e com p é múltiplo da identidade (lema de Schur).

Para $\omega \in \mathbb{R}$ arbitrário, defina o operador unitário

$$V(\omega) = e^{i\omega q/\hbar}, \quad V(\omega)^\dagger = V(-\omega), \quad V(\omega)V(\omega') = V(\omega + \omega').$$

Da relação de comutação segue, para qualquer função inteira f , $[p, f(q)] = -i\hbar f'(q)$ (demonstra-se por indução em potências de q : $[p, q^n] = -i\hbar n q^{n-1}$, e por linearidade e convergência da série). Em particular,

$$[p, V(\omega)] = -i\hbar \frac{i\omega}{\hbar} e^{i\omega q/\hbar} = \omega V(\omega),$$

ou seja, a identidade de deslocamento

$$p V(\omega) = V(\omega) (p + \omega \mathbb{1}).$$

O espectro de p é toda a reta real. Como p é observável (autoadjunto), seu espectro é um subconjunto real não vazio; seja p' um ponto do espectro e $|p'\rangle$ o autovetor (generalizado) correspondente, $p |p'\rangle = p' |p'\rangle$. Da identidade de deslocamento,

$$p (V(\omega) |p'\rangle) = V(\omega) (p + \omega) |p'\rangle = (p' + \omega) (V(\omega) |p'\rangle),$$

e $V(\omega) |p'\rangle \neq 0$ porque $V(\omega)$ é unitário. Logo $p' + \omega$ também pertence ao espectro, para todo $\omega \in \mathbb{R}$: o espectro de p é invariante por translações reais arbitrárias e, portanto, é toda a reta, $\sigma(p) = \mathbb{R}$.

O espectro é puramente contínuo. Suponha, por absurdo, que algum p' fosse autovalor próprio, com autovetor normalizável $|p'\rangle$, $\| |p'\rangle \| = 1$. Então $\{V(\omega) |p'\rangle\}_{\omega \in \mathbb{R}}$ seria uma família de autovetores normalizados de p com autovalores $p' + \omega$ todos distintos; autovetores de um operador autoadjunto associados a autovalores distintos são ortogonais, e teríamos uma família ortonormal *não enumerável* em um espaço de Hilbert separável — contradição. Logo nenhum ponto do espectro é autovalor próprio: o espectro é inteiramente contínuo, estendendo-se de $-\infty$ a $+\infty$.

O espectro é não degenerado. Suponha que a multiplicidade de algum p_0 do espectro fosse maior que 1, com base ortonormal (no sentido generalizado) $\{|p_0, r\rangle\}_r$ do subespaço espectral correspondente. Como $V(\omega)$ leva unitariamente o subespaço de p' no de $p' + \omega$, a multiplicidade é a mesma em todo o espectro, e podemos definir

$$|p', r\rangle := V(p' - p_0) |p_0, r\rangle, \quad p' \in \mathbb{R}.$$

Fixe números M_{rs} quaisquer e construa

$$M = \sum_{r,s} M_{rs} \int_{-\infty}^{+\infty} dp' |p', r\rangle \langle p', s|.$$

O operador M é diagonal em blocos de p' , logo $[M, p] = 0$; e como $V(\omega) |p', r\rangle = |p' + \omega, r\rangle$ por construção, uma mudança de variável na integral dá $V(\omega) M V(\omega)^\dagger = M$ para todo ω , donde, derivando em $\omega = 0$, $[M, q] = 0$. Pela irreduzibilidade do par (q, p) , M é múltiplo da identidade para *qualquer* escolha de M_{rs} , o que força $M_{rs} \propto \delta_{rs}$ com o mesmo fator para todos os índices — isto é, o espaço de degenerescência é unidimensional. O espectro de p é, pois, não degenerado. $\square$

Normalização, completeza e escolha das fases. Sendo p um observável de espectro contínuo, não degenerado e igual a $\mathbb{R}$, o teorema espectral fornece um sistema ortonormal completo de autovetores generalizados, que normalizamos “à Dirac”:

$$\langle p' | p'' \rangle = \delta(p' - p''), \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dp' |p'\rangle \langle p'| = \mathbf{1}.$$

Como cada autovetor é único a menos de fase, fixamos as fases escolhendo um vetor fiducial $|0\rangle$ (autovalor 0) e definindo

$$|p'\rangle := V(p') |0\rangle = e^{ip'q/\hbar} |0\rangle.$$

Essa escolha é compatível com a normalização acima, pois V é unitário e $\langle p' | p'' \rangle = \langle 0 | V(p'' - p') | 0 \rangle$ depende só de $p'' - p'$. Com ela, usando a lei de grupo $V(\omega)V(p') = V(p' + \omega)$ (os expoentes comutam, pois envolvem apenas q),

$$\boxed{e^{i\omega q/\hbar} |p'\rangle = V(\omega)V(p') |0\rangle = V(p' + \omega) |0\rangle = |p' + \omega\rangle}$$

para todo ω real. $\square$

Elemento de matriz de q . Derivando $V(\omega) |p''\rangle = |p'' + \omega\rangle$ em relação a ω e tomando $\omega = 0$:

$$\frac{i}{\hbar} q |p''\rangle = \frac{\partial}{\partial p''} |p''\rangle \quad \implies \quad q |p''\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial p''} |p''\rangle.$$

Portanto

$$\begin{aligned} \langle p' | q | p'' \rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial p''} \langle p' | p'' \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial p''} \delta(p' - p'') \\ &= +i\hbar \delta'(p' - p''), \end{aligned}$$

onde δ' é a derivada da função delta em relação ao seu argumento. Equivalentemente, para $\psi(p') = \langle p' | \psi \rangle$,

$$\begin{aligned} \langle p' | q | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp'' \langle p' | q | p'' \rangle \psi(p'') = i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dp'' \delta'(p' - p'') \psi(p'') \\ &= i\hbar \frac{d\psi}{dp'}, \end{aligned}$$

isto é, na representação- p o operador q age como $q \mapsto i\hbar d/dp'$ — consistente com $[q, p] = i\hbar$, já que p age multiplicativamente. $\square$

Problema de autovalores de q na representação- p . Procuramos $|x\rangle$ tal que $q|x\rangle = x|x\rangle$. Escrevendo $\varphi_x(p') = \langle p'|x\rangle$, a equação de autovalores torna-se a EDO de primeira ordem

$$i\hbar \frac{d\varphi_x}{dp'} = x \varphi_x(p'),$$

cuja solução geral é

$$\varphi_x(p') = C e^{-ixp'/\hbar}.$$

A solução existe, é limitada e única a menos da constante C para *todo* $x \in \mathbb{R}$: o espectro de q é contínuo, não degenerado e igual a $\mathbb{R}$ (nenhuma solução é normalizável, pois $|\varphi_x|$ é constante). A constante fixa-se pela normalização à Dirac:

$$\begin{aligned} \langle x|x'\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp' \varphi_x^*(p') \varphi_{x'}(p') = |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dp' e^{i(x-x')p'/\hbar} \\ &= |C|^2 2\pi\hbar \delta(x-x'), \end{aligned}$$

logo $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ (a menos de fase) e

$$\langle p'|x\rangle = \frac{e^{-ip'x/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \quad x \in \mathbb{R}.$$

□

b) Equação integral, iteração e lema de Hadamard

$B(t) = e^{iAt} B_0 e^{-iAt}$ **resolve a equação integral.** Com A e B_0 independentes de t , $B(t)$ é diferenciável (série de $e^{\pm iAt}$ absolutamente convergente para operadores limitados; caso geral, no sentido formal usual) e

$$\begin{aligned} \frac{dB}{dt} &= iA e^{iAt} B_0 e^{-iAt} + e^{iAt} B_0 e^{-iAt} (-iA) \\ &= i[A, B(t)], \quad B(0) = B_0. \end{aligned}$$

Integrando de 0 a t e usando que A é constante (o comutador é linear e comuta com a integral em τ):

$$B(t) - B_0 = i \int_0^t [A, B(\tau)] d\tau = i \left[A, \int_0^t B(\tau) d\tau \right],$$

isto é,

$$B(t) = B_0 + i \left[A, \int_0^t B(\tau) d\tau \right],$$

como queríamos. Reciprocamente, todo $B(t)$ contínuo que satisfaz a equação integral é diferenciável e satisfaz a EDO acima com $B(0) = B_0$. □

Solução por iteração. Defina os comutadores múltiplos

$$C_0 = B_0, \quad C_{n+1} = [A, C_n],$$

e itere a equação integral a partir de $B^{(0)}(t) \equiv B_0$:

$$B^{(n+1)}(t) = B_0 + i \left[A, \int_0^t B^{(n)}(\tau) d\tau \right].$$

Afirmamos que

$$B^{(n)}(t) = \sum_{k=0}^n \frac{(it)^k}{k!} C_k.$$

De fato, vale para $n = 0$; e, supondo válido para n ,

$$\begin{aligned} B^{(n+1)}(t) &= B_0 + i \left[A, \sum_{k=0}^n \frac{i^k}{k!} \left(\int_0^t \tau^k d\tau \right) C_k \right] \\ &= B_0 + \sum_{k=0}^n \frac{i^{k+1} t^{k+1}}{(k+1)!} [A, C_k] = \sum_{k=0}^{n+1} \frac{(it)^k}{k!} C_k. \end{aligned}$$

Para A e B_0 limitados, $\|C_k\| \leq (2\|A\|)^k \|B_0\|$ e a série majorante $\|B_0\| e^{2\|A\||t|}$ converge; a iteração de Picard converge então para a única solução contínua da equação integral (a diferença de duas soluções satisfaz uma desigualdade de Gronwall homogênea e é nula). Portanto

$$B(t) = e^{iAt} B_0 e^{-iAt} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(it)^n}{n!} \underbrace{[A, [A, \dots [A, B_0]]]}_{n \text{ comutadores}}.$$

Lema de Hadamard. Tomando $t = 1$ e escrevendo $B_0 = B$:

$$e^{iA} B e^{-iA} = B + i[A, B] + \frac{i^2}{2!} [A, [A, B]] + \frac{i^3}{3!} [A, [A, [A, B]]] + \dots$$

□

c) Evolução unitária e hermiticidade do gerador

(i) U unitário $\Rightarrow H = i\hbar \dot{U}U^\dagger$ é hermitiano. De $U(t)U^\dagger(t) = \mathbb{1}$ para todo t , derivando:

$$\frac{dU}{dt} U^\dagger + U \frac{dU^\dagger}{dt} = 0 \quad \Rightarrow \quad U \frac{dU^\dagger}{dt} = -\frac{dU}{dt} U^\dagger.$$

Então, como $(dU/dt)^\dagger = dU^\dagger/dt$,

$$H^\dagger = \left(i\hbar \frac{dU}{dt} U^\dagger \right)^\dagger = -i\hbar U \frac{dU^\dagger}{dt} = +i\hbar \frac{dU}{dt} U^\dagger = H.$$

□

(ii) $i\hbar \dot{U} = HU$ com $H = H^\dagger \Rightarrow U^\dagger U$ é constante. Da equação e de sua adjunta,

$$\frac{dU}{dt} = -\frac{i}{\hbar} HU, \quad \frac{dU^\dagger}{dt} = +\frac{i}{\hbar} U^\dagger H,$$

segue

$$\frac{d}{dt} (U^\dagger U) = \frac{dU^\dagger}{dt} U + U^\dagger \frac{dU}{dt} = \frac{i}{\hbar} U^\dagger H U - \frac{i}{\hbar} U^\dagger H U = 0,$$

mesmo que $H = H(t)$ dependa do tempo. Logo $U^\dagger U$ independe de t .

□

(iii) Equação de movimento de $W = UU^\dagger$. Com as mesmas derivadas,

$$\begin{aligned}\frac{dW}{dt} &= \frac{dU}{dt} U^\dagger + U \frac{dU^\dagger}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H U U^\dagger + \frac{i}{\hbar} U U^\dagger H \\ &= -\frac{i}{\hbar} [H, W],\end{aligned}$$

ou seja,

$$i\hbar \frac{d}{dt}(UU^\dagger) = [H(t), UU^\dagger].$$

□

(iv) Unitário em $t_0 \Rightarrow$ unitário para todo t . A equação $i\hbar \dot{W} = [H(t), W]$ é uma EDO linear de primeira ordem em W . O operador constante $W(t) \equiv \mathbb{1}$ é solução, pois $[H, \mathbb{1}] = 0$, e satisfaz a condição inicial $W(t_0) = \mathbb{1}$. Pela unicidade da solução do problema de valor inicial: se W_1 e W_2 são soluções com a mesma condição inicial, a diferença $\Delta = W_1 - W_2$ satisfaz $i\hbar \dot{\Delta} = [H, \Delta]$, $\Delta(t_0) = 0$, donde

$$\|\Delta(t)\| \leq \frac{2}{\hbar} \left| \int_{t_0}^t \|H(\tau)\| \|\Delta(\tau)\| d\tau \right|,$$

e a desigualdade de Gronwall dá $\Delta \equiv 0$. Portanto, se $U(t_0)U^\dagger(t_0) = \mathbb{1}$, então $U(t)U^\dagger(t) = \mathbb{1}$ para todo t . Combinando com (ii), $U^\dagger(t)U(t) = U^\dagger(t_0)U(t_0) = \mathbb{1}$ para todo t : U permanece unitário durante toda a evolução. □

Questão 02 — Estados puros e o operador densidade

(P.8.7 e P.8.8 de Messiah; Ex. 15.23 de Merzbacher)

a) Mistura de M vetores normalizados e pureza

Sejam $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |M\rangle$ vetores de norma 1, não necessariamente ortogonais, e

$$\rho = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M |i\rangle\langle i|.$$

(1) Vetores iguais a menos de fase $\Rightarrow$ estado puro. Suponha $|i\rangle = e^{i\varphi_i} |\psi\rangle$ para todo i , com $|\psi\rangle$ normalizado e φ_i fases reais. Então

$$|i\rangle\langle i| = e^{i\varphi_i} |\psi\rangle\langle\psi| e^{-i\varphi_i} = |\psi\rangle\langle\psi|,$$

isto é, as fases se cancelam em cada projetor. Logo

$$\rho = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M |\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi|,$$

que é um projetor de posto 1 sobre um vetor normalizado: ρ representa o estado puro $|\psi\rangle$.

(2) Estado puro $\Rightarrow$ vetores iguais a menos de fase. Suponha agora que ρ represente um estado puro, ou seja, $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ com $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Seja $|\chi\rangle$ um vetor qualquer ortogonal a $|\psi\rangle$. Então

$$0 = \langle\chi|\rho|\chi\rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \langle\chi|i\rangle \langle i|\chi\rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M |\langle\chi|i\rangle|^2.$$

Trata-se de uma soma de termos não negativos que se anula; logo cada termo é nulo:

$$\langle\chi|i\rangle = 0 \quad \text{para todo } i \text{ e todo } |\chi\rangle \perp |\psi\rangle.$$

Assim cada $|i\rangle$ é ortogonal a todo o complemento ortogonal de $|\psi\rangle$, ou seja, $|i\rangle$ pertence ao subespaço unidimensional gerado por $|\psi\rangle$:

$$|i\rangle = c_i |\psi\rangle, \quad c_i \in \mathbb{C}.$$

Como $\langle i|i\rangle = |c_i|^2 = 1$, temos $c_i = e^{i\varphi_i}$, isto é, todos os M vetores são iguais a $|\psi\rangle$ a menos de uma fase global. $\square$

b) Critério de pureza: $\text{Tr } \rho^2 = 1$

Seja ρ hermitiano, positivo semidefinido, com $\text{Tr } \rho = 1$. Pelo teorema espectral, existe uma base ortonormal $\{|\psi_k\rangle\}$ tal que

$$\rho = \sum_k w_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|, \quad w_k \geq 0, \quad \sum_k w_k = 1.$$

Então

$$\rho^2 = \sum_k w_k^2 |\psi_k\rangle\langle\psi_k| \implies \text{Tr } \rho^2 = \sum_k w_k^2.$$

Necessidade. Se $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ é puro, então $\rho^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = \rho$ e $\text{Tr } \rho^2 = \text{Tr } \rho = 1$.

Suficiência. Suponha $\text{Tr } \rho^2 = 1$. Como $0 \leq w_k \leq 1$ (pois $w_k \geq 0$ e $\sum_k w_k = 1$), vale $w_k^2 \leq w_k$, com igualdade se e somente se $w_k \in \{0, 1\}$. Logo

$$1 = \sum_k w_k^2 \leq \sum_k w_k = 1,$$

e a igualdade força $w_k^2 = w_k$ para todo k : cada w_k é 0 ou 1. Como a soma vale 1, exatamente um autovalor é 1 e os demais são nulos, isto é,

$$\rho = |\psi_{k_0}\rangle\langle\psi_{k_0}|,$$

um estado puro. Portanto $\text{Tr } \rho^2 = 1$ é condição necessária e suficiente para pureza. $\square$

c) As desigualdades (15.120)

Desigualdades de traço. Na base de autoestados de ρ , $\text{Tr } \rho^2 = \sum_k w_k^2 \geq 0$, pois é soma de quadrados. Além disso, como $w_k \geq 0$,

$$\text{Tr } \rho^2 = \sum_k w_k^2 \leq \sum_k w_k^2 + \sum_{k \neq l} w_k w_l = \left(\sum_k w_k \right)^2 = (\text{Tr } \rho)^2 = 1,$$

pois os termos cruzados $w_k w_l \geq 0$ apenas acrescentam contribuições não negativas. Logo

$$0 \leq \text{Tr } \rho^2 \leq (\text{Tr } \rho)^2 = 1.$$

Desigualdade $\rho_{ii}\rho_{jj} \geq |\rho_{ij}|^2$. Seja $\{|\psi_i\rangle\}$ uma base ortonormal qualquer e $\rho_{ij} = \langle\psi_i|\rho|\psi_j\rangle$. Considere, seguindo a sugestão do enunciado, o estado normalizado de superposição

$$|\psi\rangle = c_i |\psi_i\rangle + c_j |\psi_j\rangle, \quad |c_i|^2 + |c_j|^2 = 1.$$

A probabilidade de encontrar o sistema nesse estado é

$$\begin{aligned} P(\psi) &= \langle\psi|\rho|\psi\rangle \\ &= |c_i|^2 \rho_{ii} + |c_j|^2 \rho_{jj} + c_i^* c_j \rho_{ij} + c_j^* c_i \rho_{ji} \geq 0, \end{aligned}$$

pois ρ é positivo semidefinido. Escrevendo $c_i = |c_i|$, $c_j = |c_j|e^{i\alpha}$ e $\rho_{ij} = |\rho_{ij}|e^{i\beta}$ (note $\rho_{ji} = \rho_{ij}^*$ pela hermiticidade), obtemos

$$P(\psi) = |c_i|^2 \rho_{ii} + |c_j|^2 \rho_{jj} + 2|c_i||c_j||\rho_{ij}| \cos(\alpha + \beta) \geq 0.$$

A desigualdade deve valer para toda escolha de fases; o caso mais restritivo (que maximiza a probabilidade no sentido de tornar o termo cruzado extremal) é $\cos(\alpha + \beta) = -1$:

$$|c_i|^2 \rho_{ii} + |c_j|^2 \rho_{jj} \geq 2|c_i||c_j||\rho_{ij}| \quad \text{para todos } |c_i|, |c_j|.$$

Trata-se de uma forma quadrática em $(|c_i|, |c_j|)$:

$$\rho_{ii} x^2 - 2|\rho_{ij}|xy + \rho_{jj} y^2 \geq 0, \quad x, y \geq 0.$$

Se $\rho_{jj} = 0$, tomando y grande frente a x conclui-se $|\rho_{ij}| = 0$ e a desigualdade é trivial. Se $\rho_{jj} > 0$, a forma quadrática em $t = x/y$ é $\rho_{ii}t^2 - 2|\rho_{ij}|t + \rho_{jj} \geq 0$ para todo $t \geq 0$; como $\rho_{ii} \geq 0$, a não negatividade exige discriminante não positivo:

$$4|\rho_{ij}|^2 - 4\rho_{ii}\rho_{jj} \leq 0 \iff \rho_{ii}\rho_{jj} \geq |\rho_{ij}|^2.$$

Em particular, um elemento de matriz não diagonal de ρ só pode ser não nulo se as duas populações correspondentes forem não nulas. $\square$

Questão 03 — Constantes do movimento e representações de operadores

(Merzbacher, Ex. 14.9 e Ex. 15.2)

a) Constantes do movimento que não comutam e degenerescência

Sejam A e B observáveis sem dependência explícita do tempo, $\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{\partial B}{\partial t} = 0$, e constantes do movimento:

$$[A, H] = 0, \quad [B, H] = 0.$$

O comutador $i[A, B]$ também é constante do movimento. A identidade de Jacobi para três operadores quaisquer é

$$[A, [B, H]] + [B, [H, A]] + [H, [A, B]] = 0.$$

Como $[B, H] = 0$ e $[H, A] = -[A, H] = 0$, os dois primeiros termos anulam-se identicamente, restando

$$[H, [A, B]] = 0 \quad \implies \quad [i[A, B], H] = i[[A, B], H] = 0.$$

O operador $C \equiv i[A, B]$ é hermitiano (pois $C^\dagger = -i(AB - BA)^\dagger = -i(BA - AB) = i[A, B] = C$) e, não tendo dependência explícita do tempo, o teorema de Ehrenfest–Heisenberg dá

$$\frac{d}{dt} \langle C \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [C, H] \rangle = 0.$$

Logo, ou A e B comutam ($C = 0$), ou $C = i[A, B]$ é uma nova constante do movimento. $\square$

Espectro não degenerado de $H \Rightarrow [A, B] = 0$. Suponha que todo o espectro de H seja não degenerado: $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, com $E_n \neq E_m$ para $n \neq m$, e $\{|n\rangle\}$ base ortonormal completa. De $[A, H] = 0$,

$$0 = \langle m|[A, H]|n\rangle = (E_n - E_m) \langle m|A|n\rangle \quad \implies \quad \langle m|A|n\rangle = 0 \quad (m \neq n),$$

pois $E_n - E_m \neq 0$. Portanto A é diagonal na base $\{|n\rangle\}$: $A|n\rangle = a_n|n\rangle$ com $a_n = \langle n|A|n\rangle$. O mesmo argumento vale para B : $B|n\rangle = b_n|n\rangle$. Dois operadores diagonais na mesma base comutam:

$$[A, B]|n\rangle = (a_nb_n - b_na_n)|n\rangle = 0 \quad \forall n \quad \implies \quad [A, B] = 0$$

pela completeza de $\{|n\rangle\}$. $\square$

Conclusão (contrapositiva). Se A e B são constantes do movimento e $[A, B] \neq 0$, então o espectro de H *não pode* ser totalmente não degenerado: existe pelo menos um autovalor de energia degenerado.

Ilustração: $A = L_x$, $B = L_y$. Tome, por exemplo,

$$H = \alpha \mathbf{L}^2 = \alpha (L_x^2 + L_y^2 + L_z^2), \quad \alpha > 0,$$

ou, mais geralmente, uma partícula em potencial central, $H = \mathbf{p}^2/2m + V(r)$ (a partícula livre é o caso $V = 0$). Em qualquer desses casos H é escalar sob rotações, de modo que

$$[L_x, H] = [L_y, H] = [L_z, H] = 0,$$

(para $H = \alpha \mathbf{L}^2$ isso segue diretamente de $[L_i, \mathbf{L}^2] = 0$). Assim L_x e L_y são constantes do movimento, mas

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \neq 0.$$

Pelo teorema, o espectro deve ser degenerado — e de fato é: para $H = \alpha \mathbf{L}^2$ os níveis $E_\ell = \alpha \hbar^2 \ell(\ell + 1)$ têm degenerescência $2\ell + 1$ (os estados $|\ell, m\rangle$, $m = -\ell, \dots, \ell$). Note ainda que $i[L_x, L_y] = -\hbar L_z$ é, como demonstrado, também uma constante do movimento. $\square$

b) Representação de $F(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ nas bases de posição e momento

Seja $F(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ expansível em série de potências, i.e. combinação linear de monômios em componentes de $\mathbf{r}$ e $\mathbf{p}$ em ordem definida. Queremos mostrar que

$$\langle \mathbf{r}' | F(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \Psi \rangle = F(\mathbf{r}', -i\hbar \nabla_{\mathbf{r}'}) \psi(\mathbf{r}'), \quad \langle \mathbf{p}' | F(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \Psi \rangle = F(i\hbar \nabla_{\mathbf{p}'}, \mathbf{p}') \bar{\psi}(\mathbf{p}'),$$

com $\psi(\mathbf{r}') = \langle \mathbf{r}' | \Psi \rangle$ e $\bar{\psi}(\mathbf{p}') = \langle \mathbf{p}' | \Psi \rangle$.

Regras elementares. Da definição dos autoestados de posição, $\mathbf{r} |\mathbf{r}'\rangle = \mathbf{r}' |\mathbf{r}'\rangle$,

$$\langle \mathbf{r}' | \mathbf{r} | \Psi \rangle = \mathbf{r}' \psi(\mathbf{r}').$$

Para o momento, usando $[x_j, p_k] = i\hbar \delta_{jk}$ e a função de transformação $\langle \mathbf{r}' | \mathbf{p}' \rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}' / \hbar}$, obtém-se a regra padrão

$$\langle \mathbf{r}' | \mathbf{p} | \Psi \rangle = \int d^3 p' \langle \mathbf{r}' | \mathbf{p}' \rangle \mathbf{p}' \bar{\psi}(\mathbf{p}') = -i\hbar \nabla_{\mathbf{r}'} \int d^3 p' \langle \mathbf{r}' | \mathbf{p}' \rangle \bar{\psi}(\mathbf{p}') = -i\hbar \nabla_{\mathbf{r}'} \psi(\mathbf{r}'),$$

pois $\mathbf{p}' e^{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}' / \hbar} = -i\hbar \nabla_{\mathbf{r}'} e^{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}' / \hbar}$. Analogamente, na base de momento,

$$\langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} | \Psi \rangle = \mathbf{p}' \bar{\psi}(\mathbf{p}'), \quad \langle \mathbf{p}' | \mathbf{r} | \Psi \rangle = +i\hbar \nabla_{\mathbf{p}'} \bar{\psi}(\mathbf{p}'),$$

o sinal + vindo de $\langle \mathbf{p}' | \mathbf{r}' \rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{-i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}' / \hbar}$ e $\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}' / \hbar} = +i\hbar \nabla_{\mathbf{p}'} e^{-i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}' / \hbar}$.

Monômios, por indução. Basta provar para um monômio genérico em ordem definida,

$$M = O_1 O_2 \cdots O_n, \quad O_k \in \{x, y, z, p_x, p_y, p_z\},$$

pois F é combinação linear de tais monômios e o elemento de matriz é linear. Indução no número n de fatores.

Base ($n = 1$): são exatamente as regras elementares acima, com $x \mapsto x'$ e $p_x \mapsto -i\hbar \partial / \partial x'$ (e componentes análogas).

Passo indutivo: suponha $\langle \mathbf{r}' | M \Phi \rangle = \widehat{M} \phi(\mathbf{r}')$ para todo estado $|\Phi\rangle$, onde $\widehat{M} = \widehat{O}_1 \cdots \widehat{O}_n$ é o operador diferencial obtido pelas substituições acima, *na mesma ordem*. Então, para $M' = O_0 M$, defina $|\Phi\rangle = M |\Psi\rangle$; pela base da indução aplicada a O_0 ,

$$\langle \mathbf{r}' | O_0 M \Psi \rangle = \langle \mathbf{r}' | O_0 |\Phi\rangle = \widehat{O}_0 \langle \mathbf{r}' | \Phi \rangle = \widehat{O}_0 \widehat{M} \psi(\mathbf{r}'),$$

onde usamos que a regra elementar vale para qualquer ket (em particular $|\Phi\rangle$), e em seguida a hipótese de indução. O operador diferencial resultante $\widehat{O}_0 \widehat{M}$ preserva a ordem dos fatores do monômio original — ponto essencial, já que x' e $-i\hbar \partial / \partial x'$ não comutam, exatamente como x e p_x . Assim, para todo monômio e, por linearidade, para toda série de potências convergente,

$$\langle \mathbf{r}' | F(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \Psi \rangle = F(\mathbf{r}', -i\hbar \nabla_{\mathbf{r}'}) \psi(\mathbf{r}').$$

O argumento na base de momento é idêntico, trocando as regras elementares: $p_x \mapsto p'_x$ e $x \mapsto +i\hbar \partial / \partial p'_x$ (idem para as demais componentes), sempre respeitando a ordem dos fatores:

$$\langle \mathbf{p}' | F(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \Psi \rangle = F(i\hbar \nabla_{\mathbf{p}'}, \mathbf{p}') \bar{\psi}(\mathbf{p}').$$

Note a assimetria de sinais, $-i\hbar \nabla_{\mathbf{r}'}$ contra $+i\hbar \nabla_{\mathbf{p}'}$, consequência direta de $[x, p_x] = i\hbar$ e da fase relativa entre $\langle \mathbf{r}' | \mathbf{p}' \rangle$ e $\langle \mathbf{p}' | \mathbf{r}' \rangle$. $\square$

Questão 04 — Dispersão de um pacote livre via teorema de Ehrenfest

(Merzbacher, Problema 3.2)

Para a partícula livre em uma dimensão,

$$H = \frac{p^2}{2m},$$

queremos obter a variância $(\Delta x)_t^2 = \langle x^2 \rangle_t - \langle x \rangle_t^2$ sem recorrer à função de onda, usando apenas a equação de movimento dos valores esperados (Eq. 3.44 de Merzbacher),

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

válida para operadores A sem dependência explícita do tempo.

Comutadores necessários

Usando $[x, p] = i\hbar \mathbb{1}$:

$$[H, x] = \frac{1}{2m} [p^2, x] = \frac{1}{2m} (p[p, x] + [p, x]p) = \frac{1}{2m} (-i\hbar p - i\hbar p) = -\frac{i\hbar}{m} p,$$

$$[H, x^2] = x[H, x] + [H, x]x = -\frac{i\hbar}{m} (xp + px),$$

$$[H, xp + px] = [H, x]p + x[H, p] + [H, p]x + p[H, x] = -\frac{i\hbar}{m} (p^2 + p^2) = -\frac{2i\hbar}{m} p^2,$$

onde usamos $[H, p] = 0$ (partícula livre). Também, trivialmente, $[H, p^2] = 0$.

Equações de movimento e sua integração

Substituindo na equação de Ehrenfest:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle p \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [H, p] \rangle = 0 & \implies & \langle p \rangle_t = \langle p \rangle = \text{const.}, \\ \frac{d}{dt} \langle p^2 \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [H, p^2] \rangle = 0 & \implies & \langle p^2 \rangle_t = \langle p^2 \rangle = \text{const.}, \\ \frac{d}{dt} \langle x \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [H, x] \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m} & \implies & \langle x \rangle_t = \langle x \rangle_0 + \frac{\langle p \rangle}{m} t, \\ \frac{d}{dt} \langle xp + px \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [H, xp + px] \rangle = \frac{2\langle p^2 \rangle}{m} & \implies & \langle xp + px \rangle_t = \langle xp + px \rangle_0 + \frac{2\langle p^2 \rangle}{m} t, \\ \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [H, x^2] \rangle = \frac{\langle xp + px \rangle_t}{m}. \end{aligned}$$

As duas primeiras equações já mostram que

$$(\Delta p)_t^2 = \langle p^2 \rangle_t - \langle p \rangle_t^2 = \langle p^2 \rangle_0 - \langle p \rangle_0^2 = (\Delta p)_0^2 \equiv (\Delta p)^2,$$

isto é, a dispersão em momento é constante no tempo, como esperado para um sistema livre.

Integrando agora a última equação, com $\langle xp + px \rangle_t$ linear em t :

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_t &= \langle x^2 \rangle_0 + \frac{1}{m} \int_0^t \left[\langle xp + px \rangle_0 + \frac{2\langle p^2 \rangle}{m} t' \right] dt' \\ &= \langle x^2 \rangle_0 + \frac{\langle xp + px \rangle_0}{m} t + \frac{\langle p^2 \rangle}{m^2} t^2. \end{aligned}$$

Por outro lado,

$$\langle x \rangle_t^2 = \left(\langle x \rangle_0 + \frac{\langle p \rangle}{m} t \right)^2 = \langle x \rangle_0^2 + \frac{2 \langle x \rangle_0 \langle p \rangle}{m} t + \frac{\langle p \rangle^2}{m^2} t^2.$$

Resultado

Subtraindo,

$$\begin{aligned} (\Delta x)_t^2 &= \langle x^2 \rangle_t - \langle x \rangle_t^2 \\ &= \left(\langle x^2 \rangle_0 - \langle x \rangle_0^2 \right) + \frac{2}{m} \left[\frac{1}{2} \langle xp + px \rangle_0 - \langle x \rangle_0 \langle p \rangle \right] t + \frac{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}{m^2} t^2, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\boxed{(\Delta x)_t^2 = (\Delta x)_0^2 + \frac{2}{m} \left[\frac{1}{2} \langle xp + px \rangle_0 - \langle x \rangle_0 \langle p \rangle \right] t + \frac{(\Delta p)^2}{m^2} t^2, \quad (\Delta p)_t^2 = (\Delta p)^2.}$$

A variância em posição é um polinômio quadrático em t com coeficiente de t^2 estritamente positivo, $(\Delta p)^2/m^2 > 0$: para tempos longos o pacote sempre se alarga linearmente, $\Delta x \sim (\Delta p/m) t$, independentemente do estado inicial. O termo linear, controlado pela correlação simetrizada posição-momento $\frac{1}{2} \langle xp + px \rangle_0 - \langle x \rangle_0 \langle p \rangle$, pode ser negativo, permitindo uma contração inicial do pacote até um mínimo, seguida do alargamento inevitável. $\square$

Questão 05 — Regra de soma de Thomas–Reiche–Kuhn

(Le Bellac, Problema 8.5.5)

Seja uma partícula de massa m com hamiltoniano

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

e sejam $|n\rangle$ os autovetores de H , $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, formando uma base completa, $\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}$. Escrevemos $r_1 = x$, $r_2 = y$, $r_3 = z$.

a) O comutador duplo $[[r_i, H], r_j]$

Como $V(\mathbf{r})$ é função apenas das posições, $[r_i, V(\mathbf{r})] = 0$, e portanto

$$[r_i, H] = \frac{1}{2m} [r_i, p^2] = \frac{1}{2m} \sum_k [r_i, p_k^2] = \frac{1}{2m} \sum_k (p_k [r_i, p_k] + [r_i, p_k] p_k) = \frac{i\hbar}{m} p_i,$$

onde usamos $[r_i, p_k] = i\hbar \delta_{ik} \mathbb{1}$. Em particular, $[x, H] = i\hbar p_x/m$. Comutando agora com r_j :

$$[[r_i, H], r_j] = \frac{i\hbar}{m} [p_i, r_j] = \frac{i\hbar}{m} (-i\hbar \delta_{ij}) \mathbb{1}$$

$$[[r_i, H], r_j] = \frac{\hbar^2}{m} \delta_{ij} \mathbb{1}.$$

b) A regra de soma

Tomemos $i = j = 1$ (a componente x) e o valor esperado no estado fundamental $|0\rangle$:

$$\langle 0 | [[x, H], x] | 0 \rangle = \frac{\hbar^2}{m}.$$

Expandindo o comutador duplo,

$$\begin{aligned} [[x, H], x] &= [x, H]x - x[x, H] = xHx - Hx^2 - x^2H + xHx \\ &= 2xHx - Hx^2 - x^2H. \end{aligned}$$

Inserindo a relação de completeza $\mathbb{1} = \sum_n |n\rangle\langle n|$ entre os operadores e usando $H|0\rangle = E_0|0\rangle$, $\langle 0|H = E_0\langle 0|$, $H|n\rangle = E_n|n\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle 0 | 2xHx | 0 \rangle &= 2 \sum_n \langle 0 | x | n \rangle \langle n | Hx | 0 \rangle = 2 \sum_n E_n \langle 0 | x | n \rangle \langle n | x | 0 \rangle = 2 \sum_n E_n |\langle n | x | 0 \rangle|^2, \\ \langle 0 | Hx^2 | 0 \rangle &= E_0 \sum_n \langle 0 | x | n \rangle \langle n | x | 0 \rangle = E_0 \sum_n |\langle n | x | 0 \rangle|^2, \\ \langle 0 | x^2 H | 0 \rangle &= E_0 \sum_n |\langle n | x | 0 \rangle|^2, \end{aligned}$$

onde usamos a hermiticidade de x , $\langle 0 | x | n \rangle = \langle n | x | 0 \rangle^*$, de modo que $\langle 0 | x | n \rangle \langle n | x | 0 \rangle = |\langle n | x | 0 \rangle|^2 \geq 0$. Somando as três contribuições:

$$\langle 0 | [[x, H], x] | 0 \rangle = 2 \sum_n (E_n - E_0) |\langle n | x | 0 \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{m}.$$

Portanto,

$$\frac{2m}{\hbar^2} \sum_n (E_n - E_0) |\langle n | x | 0 \rangle|^2 = 1.$$

Comentário

Todos os termos da soma são não negativos, pois $E_n \geq E_0$ (o estado fundamental minimiza a energia) e $|\langle n|x|0\rangle|^2 \geq 0$. Definindo as *forças de oscilador*

$$f_{n0} = \frac{2m}{\hbar^2}(E_n - E_0)|\langle n|x|0\rangle|^2,$$

a regra de soma de Thomas–Reiche–Kuhn diz que $\sum_n f_{n0} = 1$: as forças de oscilador das transições dipolares a partir do fundamental somam exatamente a unidade, resultado independente da forma do potencial $V(\mathbf{r})$. Historicamente, essa regra (obtida ainda em 1925) foi uma das primeiras verificações quantitativas da mecânica matricial na dispersão da luz por átomos. $\square$

Questão 06 — Poço infinito unidimensional

(P.3.12, Cohen-Tannoudji)

Enunciado (resumido). Uma partícula de massa m está confinada num poço infinito de largura a ($0 \leq x \leq a$). Os autoestados do hamiltoniano são

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

No instante $t = 0$ o estado da partícula é

$$|\psi(0)\rangle = a_1 |\varphi_1\rangle + a_2 |\varphi_2\rangle + a_3 |\varphi_3\rangle + a_4 |\varphi_4\rangle, \quad \sum_{n=1}^4 |a_n|^2 = 1.$$

a) Qual a probabilidade de, medindo a energia, encontrar um valor menor que $3\pi^2 \hbar^2 / ma^2$? b) Quais o valor médio e o desvio quadrático médio da energia nesse estado? c) Escreva $|\psi(t)\rangle$. Os resultados de (a) e (b) valem num instante t qualquer? d) Se a medida da energia forneceu $8\pi^2 \hbar^2 / ma^2$, qual o estado imediatamente após a medida? Qual o resultado de uma nova medida da energia?

a) Probabilidade de $E < 3\pi^2 \hbar^2 / ma^2$

Escrevendo o limiar na unidade natural do problema,

$$\frac{3\pi^2 \hbar^2}{ma^2} = 6 \cdot \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2},$$

a condição $E_n < 3\pi^2 \hbar^2 / ma^2$ equivale a $n^2 < 6$, ou seja, $n = 1$ ($E_1 = \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$) e $n = 2$ ($E_2 = 4\pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$); já $n = 3$ dá $n^2 = 9 > 6$. Pelo postulado da medida, a probabilidade de obter E_n é $\mathcal{P}(E_n) = |\langle \varphi_n | \psi(0) \rangle|^2 = |a_n|^2$. Logo

$$\boxed{\mathcal{P}\left(E < \frac{3\pi^2 \hbar^2}{ma^2}\right) = |a_1|^2 + |a_2|^2}$$

No caso particular de coeficientes iguais, $|a_n|^2 = 1/4$, obtém-se $\mathcal{P} = 1/2$. □

b) Valor médio e desvio quadrático médio da energia

O valor médio é

$$\langle H \rangle = \langle \psi(0) | H | \psi(0) \rangle = \sum_{n=1}^4 |a_n|^2 E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left(|a_1|^2 + 4|a_2|^2 + 9|a_3|^2 + 16|a_4|^2 \right).$$

Analogamente,

$$\langle H^2 \rangle = \sum_{n=1}^4 |a_n|^2 E_n^2 = \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \right)^2 \left(|a_1|^2 + 16|a_2|^2 + 81|a_3|^2 + 256|a_4|^2 \right),$$

e o desvio quadrático médio (rms) é

$$\boxed{\Delta H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}}$$

Explicitamente, com $\varepsilon \equiv \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$ e $p_n \equiv |a_n|^2$,

$$\Delta H = \varepsilon \sqrt{(p_1 + 16p_2 + 81p_3 + 256p_4) - (p_1 + 4p_2 + 9p_3 + 16p_4)^2}.$$

No caso de coeficientes iguais ($p_n = 1/4$):

$$\langle H \rangle = \frac{30}{4} \varepsilon = \frac{15\pi^2 \hbar^2}{4ma^2}, \quad \langle H^2 \rangle = \frac{354}{4} \varepsilon^2, \quad \Delta H = \varepsilon \sqrt{\frac{354}{4} - \frac{900}{16}} = \frac{\sqrt{129}}{2} \varepsilon.$$

□

c) Evolução temporal $|\psi(t)\rangle$

Como $|\psi(0)\rangle$ está expandido na base de autoestados de H (hamiltoniano independente do tempo), a evolução é obtida multiplicando cada componente pelo fator de fase $e^{-iE_n t/\hbar}$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^4 a_n e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle = \sum_{n=1}^4 a_n \exp\left(-\frac{in^2\pi^2\hbar t}{2ma^2}\right) |\varphi_n\rangle.$$

As probabilidades num instante t qualquer são

$$\mathcal{P}(E_n; t) = \left| a_n e^{-iE_n t/\hbar} \right|^2 = |a_n|^2,$$

pois o módulo do fator de fase é 1. Portanto, *todas* as respostas de (a) e (b) — probabilidades, $\langle H \rangle$ e ΔH — são independentes do tempo. Isso é geral: a energia é uma constante do movimento, já que $[H, H] = 0$. □

d) Estado após a medida com resultado $8\pi^2\hbar^2/ma^2$

O resultado obtido é

$$\frac{8\pi^2\hbar^2}{ma^2} = 16 \cdot \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = E_4.$$

Pelo postulado da redução do pacote de onda, imediatamente após a medida o estado é a projeção normalizada de $|\psi\rangle$ no autoespaço de E_4 , que aqui é não degenerado:

$$|\psi_{\text{após}}\rangle = \frac{|\varphi_4\rangle\langle\varphi_4|\psi\rangle}{\| |\varphi_4\rangle\langle\varphi_4|\psi\rangle \|} = \frac{a_4}{|a_4|} |\varphi_4\rangle \equiv |\varphi_4\rangle$$

(a fase global $a_4/|a_4|$ é fisicamente irrelevante). Em representação de posição,

$$\psi_{\text{após}}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right).$$

Uma nova medida da energia, feita imediatamente em seguida, fornece com certeza (probabilidade 1) o mesmo valor

$$E_4 = \frac{8\pi^2\hbar^2}{ma^2},$$

pois o sistema já se encontra num autoestado de H — e assim permanece sob a evolução livre, a menos de fase. □

Questão 07 — Poço infinito bidimensional

(P.3.13, Cohen-Tannoudji)

Enunciado (resumido). Uma partícula de massa m está confinada num poço infinito bidimensional quadrado: $V(x, y) = 0$ para $0 \leq x \leq a$ e $0 \leq y \leq a$, e $V = \infty$ fora. As autofunções e autovalores do hamiltoniano são

$$\varphi_{nm}(x, y) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi y}{a}\right), \quad E_{nm} = \frac{(n^2 + m^2)\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n, m = 1, 2, 3, \dots$$

a) Dê os níveis de energia mais baixos e suas degenerescências. b) Discuta uma medida da energia num estado superposição dos primeiros φ_{nm} : probabilidades e estado após a medida no caso degenerado.

a) Níveis mais baixos e degenerescências

O hamiltoniano separa-se, $H = H_x + H_y$, cada parte sendo um poço infinito unidimensional; por isso $E_{nm} \propto (n^2 + m^2)$ e $E_{nm} = E_{mn}$: todo nível com $n \neq m$ é *pelo menos* duplamente degenerado (degenerescência de troca, ligada à simetria do quadrado sob $x \leftrightarrow y$). Com $\varepsilon \equiv \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$, os níveis mais baixos são:

$E_{11} = 2\varepsilon,$	$(n, m) = (1, 1),$	$g = 1$ (fundamental, não degenerado);
$E_{12} = E_{21} = 5\varepsilon,$	$(1, 2), (2, 1),$	$g = 2;$
$E_{22} = 8\varepsilon,$	$(2, 2),$	$g = 1;$
$E_{13} = E_{31} = 10\varepsilon,$	$(1, 3), (3, 1),$	$g = 2;$
$E_{23} = E_{32} = 13\varepsilon,$	$(2, 3), (3, 2),$	$g = 2;$
$E_{14} = E_{41} = 17\varepsilon,$	$(1, 4), (4, 1),$	$g = 2.$

Em resumo, $n^2 + m^2 = 2, 5, 8, 10, 13, 17, \dots$. Observação: além da degenerescência de troca, podem ocorrer degenerescências *acidentais*, quando pares (n, m) essencialmente distintos dão a mesma soma $n^2 + m^2$; o primeiro exemplo é $n^2 + m^2 = 50$, com $(1, 7), (7, 1)$ e $(5, 5)$, nível de degenerescência $g = 3$ (e $65 = 1^2 + 8^2 = 4^2 + 7^2$ dá $g = 4$). $\square$

b) Medida da energia num estado superposição; caso degenerado

Considere o sistema preparado no estado normalizado

$$|\psi\rangle = \sum_{n,m} c_{nm} |\varphi_{nm}\rangle, \quad \sum_{n,m} |c_{nm}|^2 = 1, \quad c_{nm} = \langle \varphi_{nm} | \psi \rangle,$$

por exemplo uma superposição dos primeiros estados $|\varphi_{11}\rangle, |\varphi_{12}\rangle, |\varphi_{21}\rangle, |\varphi_{22}\rangle, \dots$

Probabilidades. Como H pode ser degenerado, a probabilidade de obter um autovalor E é a soma sobre *todos* os autoestados do autoespaço correspondente:

$$\mathcal{P}(E) = \sum_{(n,m): E_{nm}=E} |\langle \varphi_{nm} | \psi \rangle|^2 = \sum_{(n,m): E_{nm}=E} |c_{nm}|^2.$$

Assim:

- nível não degenerado, e.g. $E_{11} = 2\varepsilon$: $\mathcal{P}(2\varepsilon) = |c_{11}|^2$;
- nível degenerado, e.g. $E = 5\varepsilon$: $\mathcal{P}(5\varepsilon) = |c_{12}|^2 + |c_{21}|^2$.

Estado após a medida (caso degenerado). Pelo postulado da redução, se a medida forneceu o valor E , o estado imediatamente após é a projeção *normalizada* de $|\psi\rangle$ no autoespaço $\mathcal{E}_E$ de E . Com o projetor

$$P_E = \sum_{(n,m): E_{nm}=E} |\varphi_{nm}\rangle\langle\varphi_{nm}|,$$

tem-se

$$|\psi_{\text{após}}\rangle = \frac{P_E |\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_E|\psi\rangle}} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{P}(E)}} \sum_{(n,m): E_{nm}=E} c_{nm} |\varphi_{nm}\rangle.$$

Por exemplo, se o resultado foi $E = 5\varepsilon$,

$$|\psi_{\text{após}}\rangle = \frac{c_{12} |\varphi_{12}\rangle + c_{21} |\varphi_{21}\rangle}{\sqrt{|c_{12}|^2 + |c_{21}|^2}}.$$

Dois pontos importantes:

- (i) O estado pós-medida *depende do estado inicial* através das razões entre os c_{nm} do subespaço: a medida da energia *não* determina sozinho um vetor único quando o nível é degenerado — ela apenas projeta no subespaço $\mathcal{E}_E$, preservando as amplitudes relativas dentro dele. A energia sozinho não constitui um C.C.O.C.; para especificar completamente o estado seria preciso medir também um observável que quebre a degenerescência (por exemplo, o operador de troca $x \leftrightarrow y$, que comuta com H e cujos autoestados no subespaço de 5ε são $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_{12}\rangle \pm |\varphi_{21}\rangle)$).
- (ii) Uma nova medida da energia, imediatamente após, fornece de novo E com probabilidade 1, pois $|\psi_{\text{após}}\rangle \in \mathcal{E}_E$ é autoestado de H com autovalor E .

□

Questão 08 — Sistema de três níveis: medidas de H e de A

(P.3.14, Cohen-Tannoudji)

Enunciado (resumido). Num espaço de estados tridimensional, com base ortonormal $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$, o Hamiltoniano e um observável A são representados por

$$H = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad A = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

com ω_0 e a constantes reais positivas. O estado do sistema em $t = 0$ é

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_1\rangle + \frac{1}{2}|u_2\rangle + \frac{1}{2}|u_3\rangle.$$

(a) Mede-se a energia em $t = 0$: valores possíveis, probabilidades, $\langle H \rangle$ e ΔH . (b) Mede-se A em vez de H : valores, probabilidades e estado imediatamente após a medida. (c) Calcular $|\psi(t)\rangle$ e $\langle A \rangle(t)$; discutir a dependência temporal das probabilidades. (d) Nova medida da energia após a medida de A .

a) Medida da energia em $t = 0$

Os autovalores de H são $E_1 = \hbar\omega_0$ (não degenerado, autovetor $|u_1\rangle$) e $E_2 = 2\hbar\omega_0$ (duplamente degenerado, subespaço gerado por $|u_2\rangle, |u_3\rangle$). As probabilidades são

$$P(E_1) = |\langle u_1 | \psi(0) \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2},$$

$$P(E_2) = |\langle u_2 | \psi(0) \rangle|^2 + |\langle u_3 | \psi(0) \rangle|^2 = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = \frac{1}{2}.$$

(Verificação: $P(E_1) + P(E_2) = 1$.) O valor médio e a variância:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \frac{1}{2} \hbar\omega_0 + \frac{1}{2} 2\hbar\omega_0 = \frac{3}{2} \hbar\omega_0, \\ \langle H^2 \rangle &= \frac{1}{2} (\hbar\omega_0)^2 + \frac{1}{2} (2\hbar\omega_0)^2 = \frac{5}{2} \hbar^2 \omega_0^2, \\ \Delta H &= \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = \sqrt{\frac{5}{2} - \frac{9}{4}} \hbar\omega_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}. \quad \square \end{aligned}$$

b) Medida de A em $t = 0$

Diagonalizando o bloco 2×2 de A no subespaço $\{|u_2\rangle, |u_3\rangle\}$, obtêm-se os autovalores e autovetores:

$$A|u_1\rangle = a|u_1\rangle, \quad A|\pm\rangle = \pm a|\pm\rangle, \quad |\pm\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_2\rangle \pm |u_3\rangle).$$

Logo o espectro de A é $\{+a, -a\}$, sendo $+a$ *duplamente degenerado* (subespaço gerado por $|u_1\rangle$ e $|+\rangle$) e $-a$ não degenerado. As amplitudes relevantes:

$$\langle u_1 | \psi(0) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle + | \psi(0) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle - | \psi(0) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right) = 0.$$

Portanto,

$$P(+a) = |\langle u_1 | \psi(0) \rangle|^2 + |\langle + | \psi(0) \rangle|^2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1, \quad P(-a) = 0.$$

A medida de A dá com certeza o valor $+a$: o estado $|\psi(0)\rangle$ já pertence ao autoespaço de A associado a $+a$. Pelo postulado da projeção (autovalor degenerado: projeta-se no subespaço e normaliza-se),

$$|\psi'\rangle = \frac{P_{+a} |\psi(0)\rangle}{\|P_{+a} |\psi(0)\rangle\|} = |\psi(0)\rangle,$$

ou seja, o estado *não é alterado* pela medida. □

c) Evolução temporal: $|\psi(t)\rangle$ e $\langle A \rangle(t)$

Como $|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle$ são autoestados de H ,

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_0 t} |u_1\rangle + \frac{1}{2} e^{-2i\omega_0 t} |u_2\rangle + \frac{1}{2} e^{-2i\omega_0 t} |u_3\rangle.$$

O valor médio de A :

$$\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = a \left[|c_1(t)|^2 + c_2^*(t)c_3(t) + c_3^*(t)c_2(t) \right] = a \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \right] = a,$$

pois as fases de c_2 e c_3 são iguais e se cancelam nos termos cruzados. Assim $\langle A \rangle(t) = a$, constante.

Verificação pelo comutador: $[H, A]$ atua trivialmente porque A mistura apenas $|u_2\rangle$ e $|u_3\rangle$, que pertencem ao *mesmo* autoespaço de H (autovalor $2\hbar\omega_0$). De fato,

$$HA = \hbar\omega_0 a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix} = AH \implies [H, A] = 0.$$

A é constante de movimento: *nenhuma* probabilidade de resultado de medida de A depende do tempo — em particular, $P(+a) = 1$ e $P(-a) = 0$ para todo t . □

d) Nova medida da energia após a medida de A

Como visto em (b), a medida de A deixa o estado inalterado: $|\psi'\rangle = |\psi(0)\rangle$. Uma medida subsequente da energia dá, portanto, os mesmos resultados do item (a):

$$E_1 = \hbar\omega_0 \text{ com } P = \frac{1}{2}, \quad E_2 = 2\hbar\omega_0 \text{ com } P = \frac{1}{2},$$

e, após essa medida, o estado colapsa em $|u_1\rangle$ (se E_1) ou em $\frac{1}{\sqrt{2}}(|u_2\rangle + |u_3\rangle) = |+\rangle$ (se E_2 , projeção normalizada no autoespaço degenerado). Como $[H, A] = 0$, os dois observáveis são compatíveis e as medidas sucessivas não se perturbam. □

Questão 09 — Duas partículas sem interação num poço infinito

(P.3.16, Cohen-Tannoudji)

Enunciado (resumido). Duas partículas (1) e (2), de massas m_1 e m_2 , não interagem entre si e estão ambas num poço de potencial infinito de largura a ($V(x) = 0$ para $0 < x < a$, $V = \infty$ fora). O Hamiltoniano total é

$$H = H_1 + H_2, \quad H_i = \frac{p_i^2}{2m_i} + V(x_i),$$

onde H_1 e H_2 atuam, respectivamente, nos espaços $\mathcal{E}_1$ e $\mathcal{E}_2$, sendo $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$. (a) Autoestados e autovalores de H ; caso $m_1 = m_2 = m$: níveis e degenerescências. (b) Para um estado dado do sistema, probabilidades de medidas da energia total e da energia de uma só partícula; estado após a medida. (c) Correlações entre medidas sobre (1) e (2).

a) Autoestados e autovalores de H

Para uma partícula de massa m_i no poço infinito, os autoestados de H_i são

$$\varphi_n^{(i)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad H_i |\varphi_n^{(i)}\rangle = n^2 \varepsilon_i |\varphi_n^{(i)}\rangle, \quad \varepsilon_i \equiv \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_i a^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Como $[H_1, H_2] = 0$ (atuam em espaços diferentes), os produtos tensoriais

$$|\varphi_n^{(1)}\rangle \otimes |\varphi_m^{(2)}\rangle \equiv |\varphi_n \varphi_m\rangle$$

formam uma base de autoestados de H , com autovalores

$$H |\varphi_n \varphi_m\rangle = E_{nm} |\varphi_n \varphi_m\rangle, \quad E_{nm} = n^2 \varepsilon_1 + m^2 \varepsilon_2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2a^2} \left(\frac{n^2}{m_1} + \frac{m^2}{m_2} \right).$$

Se m_1/m_2 for irracional, todos os níveis são não degenerados.

Caso $m_1 = m_2 = m$: $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 \equiv \varepsilon = \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$ e

$$E_{nm} = (n^2 + m^2) \varepsilon.$$

Os primeiros níveis:

$E_{11} = 2\varepsilon$	não degenerado $(n, m) = (1, 1)$;
$E_{12} = E_{21} = 5\varepsilon$	duplamente degenerado $(1, 2), (2, 1)$;
$E_{22} = 8\varepsilon$	não degenerado $(2, 2)$;
$E_{13} = E_{31} = 10\varepsilon$	duplamente degenerado $(1, 3), (3, 1)$;
$E_{23} = E_{32} = 13\varepsilon$	duplamente degenerado $(2, 3), (3, 2)$.

Em geral, todo nível com $n \neq m$ é (pelo menos) duplamente degenerado, pela troca $n \leftrightarrow m$; degenerescências acidentais adicionais ocorrem quando $n^2 + m^2$ admite mais de uma decomposição (ex.: $50 = 1^2 + 7^2 = 5^2 + 5^2$, nível triplamente degenerado). $\square$

b) Probabilidades de medidas de energia num estado dado

Considere, como exemplo típico, o estado normalizado

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |\varphi_1 \varphi_1\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |\varphi_1 \varphi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} |\varphi_2 \varphi_1\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |\varphi_2 \varphi_2\rangle$$

(com $m_1 = m_2 = m$; a soma dos módulos quadrados é $\frac{1}{6} + \frac{1}{3} + \frac{1}{6} + \frac{1}{3} = 1$).

Energia total H . Os valores possíveis são os E_{nm} presentes na expansão:

$$\begin{aligned} P(2\varepsilon) &= |\langle \varphi_1 \varphi_1 | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{6}, \\ P(5\varepsilon) &= |\langle \varphi_1 \varphi_2 | \psi \rangle|^2 + |\langle \varphi_2 \varphi_1 | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{3} + \frac{1}{6} = \frac{1}{2}, \\ P(8\varepsilon) &= |\langle \varphi_2 \varphi_2 | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{3}. \end{aligned}$$

Se a medida der 5ε (autovalor degenerado), o estado após a medida é a projeção normalizada no autoespaço:

$$|\psi'\rangle = \frac{\sqrt{\frac{1}{3}} |\varphi_1 \varphi_2\rangle + \sqrt{\frac{1}{6}} |\varphi_2 \varphi_1\rangle}{\sqrt{\frac{1}{3} + \frac{1}{6}}} = \sqrt{\frac{2}{3}} |\varphi_1 \varphi_2\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |\varphi_2 \varphi_1\rangle,$$

que é um estado *emaranhado* (não fatorável).

Energia da partícula (1) apenas (H_1). H_1 atua como $H_1 \otimes \mathbb{1}$ em $\mathcal{E}$. Somam-se as probabilidades sobre todos os estados da partícula (2):

$$\begin{aligned} P_1(\varepsilon) &= \sum_m |\langle \varphi_1 \varphi_m | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{6} + \frac{1}{3} = \frac{1}{2}, \\ P_1(4\varepsilon) &= \sum_m |\langle \varphi_2 \varphi_m | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{6} + \frac{1}{3} = \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Se a medida de H_1 der ε (isto é, $n = 1$), o estado colapsa na projeção normalizada

$$|\psi''\rangle = \frac{\left(|\varphi_1^{(1)}\rangle \langle \varphi_1^{(1)}| \otimes \mathbb{1} \right) |\psi\rangle}{\|\dots\|} = |\varphi_1^{(1)}\rangle \otimes \left[\frac{1}{\sqrt{3}} |\varphi_1^{(2)}\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |\varphi_2^{(2)}\rangle \right],$$

que é um estado produto: a partícula (2) fica descrita por um vetor de estado bem definido, atualizado pela medida sobre (1). De modo equivalente, antes de qualquer medida a partícula (2) isolada é descrita pelo operador densidade reduzido $\rho^{(2)} = \text{Tr}_1 |\psi\rangle\langle\psi|$, que aqui *não* é um projetor (estado misto), refletindo o emaranhamento de $|\psi\rangle$. $\square$

c) Correlações entre as duas partículas

Estado produto. Se $|\psi\rangle = |\chi^{(1)}\rangle \otimes |\eta^{(2)}\rangle$, então, para observáveis A_1 (de $\mathcal{E}_1$) e B_2 (de $\mathcal{E}_2$),

$$P(a_n, b_m) = |\langle a_n | \chi \rangle|^2 |\langle b_m | \eta \rangle|^2 = P_1(a_n) P_2(b_m) :$$

as probabilidades conjuntas fatoram, e o resultado de uma medida sobre (1) não altera as previsões sobre (2) (a projeção atua só no primeiro fator). As partículas são *não correlacionadas*.

Estado emaranhado. Se $|\psi\rangle = \sum_{n,m} c_{nm} |\varphi_n \varphi_m\rangle$ com c_{nm} não fatorável ($c_{nm} \neq \alpha_n \beta_m$), as medidas ficam correlacionadas. No exemplo do item (b), após a medida da energia total ter dado 5ε :

$$|\psi'\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |\varphi_1 \varphi_2\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |\varphi_2 \varphi_1\rangle.$$

Medindo H_1 : $P_1(\varepsilon) = \frac{2}{3}$ e $P_1(4\varepsilon) = \frac{1}{3}$. Mas, *condicionado* ao resultado de H_1 , o resultado de H_2 fica completamente determinado:

$$\begin{aligned} H_1 \rightarrow \varepsilon \ (n = 1) &\implies H_2 \rightarrow 4\varepsilon \text{ com certeza,} \\ H_1 \rightarrow 4\varepsilon \ (n = 2) &\implies H_2 \rightarrow \varepsilon \text{ com certeza,} \end{aligned}$$

pois a projeção pela medida sobre (1) seleciona um único termo da superposição. Assim $P(n=1, m=1) = 0 \neq P_1(\varepsilon)P_2(\varepsilon)$: as probabilidades conjuntas não fatoram. Correlação perfeita entre as energias individuais — assinatura do emaranhamento — mesmo sem qualquer interação entre as partículas no instante da medida. $\square$

Questão 10 — Derivada de operadores dependentes de um parâmetro

(Messiah, Problema 8.3)

Seja $A(\xi)$ um operador que depende de um parâmetro real ξ . Define-se a derivada

$$\frac{dA}{d\xi} \equiv \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{A(\xi + \varepsilon) - A(\xi)}{\varepsilon},$$

entendida no sentido de que o limite existe quando aplicado aos vetores do domínio comum apropriado.

a) $\frac{d}{d\xi} e^{i\xi O} = iO e^{i\xi O}$ para O observável

Como O é um observável (autoadjunto), o operador unitário $e^{i\xi O}$ é definido pela série de potências

$$e^{i\xi O} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\xi)^n}{n!} O^n.$$

Formalmente, em qualquer subespaço em que a série convirja uniformemente em ξ (por exemplo, no subespaço gerado por autovetores de O , onde $O^n |o\rangle = o^n |o\rangle$ e a série é a exponencial numérica $e^{i\xi o}$, absolutamente convergente), podemos derivar termo a termo. Calculemos diretamente pela definição:

$$\frac{e^{i(\xi+\varepsilon)O} - e^{i\xi O}}{\varepsilon} = \frac{e^{i\varepsilon O} - \mathbb{1}}{\varepsilon} e^{i\xi O},$$

onde usamos que $e^{i(\xi+\varepsilon)O} = e^{i\varepsilon O} e^{i\xi O}$, válido porque ambos os fatores são funções do *mesmo* operador O e portanto comutam (a fórmula do produto de exponenciais vale sem termos de comutador). Expandindo o primeiro fator em série,

$$\frac{e^{i\varepsilon O} - \mathbb{1}}{\varepsilon} = \frac{1}{\varepsilon} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(i\varepsilon)^n}{n!} O^n = iO + \varepsilon \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(i)^n \varepsilon^{n-2}}{n!} O^n.$$

Aplicado a um autovetor $|o\rangle$ de O , o termo restante vale

$$\varepsilon \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(i)^n \varepsilon^{n-2}}{n!} o^n |o\rangle,$$

cuja norma é majorada por $\varepsilon e^{|o|}$ para $|\varepsilon| \leq 1$, indo a zero quando $\varepsilon \rightarrow 0$. Pela decomposição espectral de O , o mesmo vale em todo o domínio denso apropriado. Logo

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{e^{i\varepsilon O} - \mathbb{1}}{\varepsilon} = iO, \quad \implies \quad \frac{d}{d\xi} e^{i\xi O} = iO e^{i\xi O}.$$

Note que, como O comuta com $e^{i\xi O}$, também podemos escrever o resultado como $e^{i\xi O} iO$. $\square$

b) Regra do produto: $\frac{d(AB)}{d\xi} = \frac{dA}{d\xi} B + A \frac{dB}{d\xi}$

Sejam $A(\xi)$ e $B(\xi)$ diferenciáveis. Escrevemos, para $\varepsilon \neq 0$, a identidade algébrica (somando e subtraindo $A(\xi + \varepsilon)B(\xi)$):

$$\frac{A(\xi + \varepsilon)B(\xi + \varepsilon) - A(\xi)B(\xi)}{\varepsilon} = \frac{A(\xi + \varepsilon) - A(\xi)}{\varepsilon} B(\xi) + A(\xi + \varepsilon) \frac{B(\xi + \varepsilon) - B(\xi)}{\varepsilon}.$$

No limite $\varepsilon \rightarrow 0$: o primeiro termo tende a $\frac{dA}{d\xi} B(\xi)$ pela definição da derivada de A ; no segundo, $A(\xi + \varepsilon) \rightarrow A(\xi)$ (diferenciabilidade implica continuidade, pois $A(\xi + \varepsilon) - A(\xi) = \varepsilon \cdot [\text{quociente limitado}] \rightarrow 0$) e o quociente tende a $\frac{dB}{d\xi}$. Portanto

$$\frac{d}{d\xi}(AB) = \frac{dA}{d\xi} B + A \frac{dB}{d\xi}.$$

Observe que a *ordem* dos fatores foi preservada em cada passo da manipulação algébrica acima: em nenhum momento comutamos operadores. O resultado *não* pode ser escrito como $B \frac{dA}{d\xi} + \frac{dB}{d\xi} A$ em geral, pois A , B e suas derivadas não comutam entre si. $\square$

c) Derivada do inverso: $\frac{d(A^{-1})}{d\xi} = -A^{-1} \frac{dA}{d\xi} A^{-1}$

Suponha $A(\xi)$ diferenciável e inversível para cada ξ (com $A^{-1}(\xi)$ também diferenciável). Partimos da identidade

$$A(\xi) A^{-1}(\xi) = \mathbf{1},$$

válida para todo ξ . Como o lado direito é constante, sua derivada é nula. Aplicando a regra do produto do item (b) ao lado esquerdo:

$$\frac{dA}{d\xi} A^{-1} + A \frac{dA^{-1}}{d\xi} = 0.$$

Isolando o segundo termo,

$$A \frac{dA^{-1}}{d\xi} = -\frac{dA}{d\xi} A^{-1},$$

e multiplicando à esquerda por A^{-1} (a multiplicação à *esquerda* é essencial, pois os operadores não comutam):

$$\boxed{\frac{dA^{-1}}{d\xi} = -A^{-1} \frac{dA}{d\xi} A^{-1}.}$$

Como verificação de consistência, no caso escalar $A = a(\xi)$ recupera-se $\frac{d}{d\xi}(1/a) = -a'/a^2$. $\square$

Questão 11 — Elementos de matriz de $f(p)$, base de momento e ordenamentos

(Merzbacher, Exercícios 9.21, 9.22 e 14.5)

a) $\langle x'' | f(p) | x' \rangle = f\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x''}\right) \delta(x'' - x')$

Ponto de partida: o elemento de matriz do operador momento na base de posição,

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

Mostremos por indução que, para todo $n \geq 0$,

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

Base: para $n = 0$, $\langle x'' | \mathbb{1} | x' \rangle = \langle x'' | x' \rangle = \delta(x'' - x')$. Para $n = 1$ é a relação de partida.

Passo indutivo: suponha a fórmula válida para n . Inserindo a resolução da identidade $\mathbb{1} = \int dx |x\rangle \langle x|$,

$$\begin{aligned} \langle x'' | p^{n+1} | x' \rangle &= \int dx \langle x'' | p | x \rangle \langle x | p^n | x' \rangle \\ &= \int dx \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x''}\right) \delta(x'' - x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^n \delta(x - x'). \end{aligned}$$

A derivada em x'' pode ser retirada da integral (atua só na primeira delta), e a integração em x contra $\delta(x'' - x)$ substitui $x \rightarrow x''$ na função restante:

$$\begin{aligned} \langle x'' | p^{n+1} | x' \rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x''} \int dx \delta(x'' - x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^n \delta(x - x') \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x''} \left[\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x''}\right)^n \delta(x'' - x') \right] = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x''}\right)^{n+1} \delta(x'' - x'), \end{aligned}$$

completando a indução.

Agora seja $f(p) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n p^n$ expansível em série de potências. Por linearidade (e trocando formalmente soma com o elemento de matriz, o que é legítimo no sentido de distribuições, pois cada termo atua sobre funções de teste suaves),

$$\begin{aligned} \langle x'' | f(p) | x' \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \langle x'' | p^n | x' \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x''}\right)^n \delta(x'' - x') \\ &= f\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x''}\right) \delta(x'' - x'). \end{aligned}$$

□

b) Coeficientes de transformação $\langle x' | p' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'x'/\hbar}$

Seja $|p'\rangle$ autoestado do momento, $p|p'\rangle = p'|p'\rangle$. Projetando na base de posição e usando a representação de p obtida no item (a),

$$\begin{aligned} \langle x' | p | p' \rangle &= \int dx'' \langle x' | p | x'' \rangle \langle x'' | p' \rangle = \int dx'' \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\right) \delta(x' - x'') \langle x'' | p' \rangle \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | p' \rangle. \end{aligned}$$

Por outro lado, $\langle x'|p|p'\rangle = p' \langle x'|p'\rangle$. Obtemos assim a equação diferencial de primeira ordem

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

cuja solução geral é

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

A constante N é fixada pela normalização de delta na base de momento. Inserindo a completeza em x' :

$$\begin{aligned} \langle p'|p''\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle p'|x'\rangle \langle x'|p''\rangle = N^*(p')N(p'') \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{i(p''-p')x'/\hbar} \\ &= N^*(p')N(p'') 2\pi\hbar \delta(p'' - p'), \end{aligned}$$

onde se usou $\int dx e^{ikx} = 2\pi\delta(k)$ com $k = (p'' - p')/\hbar$ e $\delta(k) = \hbar \delta(p'' - p')$. Impondo $\langle p'|p''\rangle = \delta(p' - p'')$ resulta $|N|^2 2\pi\hbar = 1$, ou seja, escolhendo a fase convencional N real e positivo,

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

Consequentemente a mudança de representação é a transformada de Fourier: $\phi(p') = \langle p'|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx' e^{-ip'x'/\hbar} \psi(x')$. □

c) $x^2 p_x^2 + p_x^2 x^2$ e $\frac{1}{2}(xp_x + p_x x)^2$ diferem por termos de ordem $\hbar^2$

Escrevamos $p \equiv p_x$ e usemos $[x, p] = i\hbar$. Queremos calcular explicitamente

$$\Delta \equiv x^2 p^2 + p^2 x^2 - \frac{1}{2}(xp + px)^2.$$

Primeiro, expandimos o quadrado mantendo a ordem dos fatores:

$$(xp + px)^2 = xpxp + xppx + pxxp + ppxx.$$

Reduzimos cada termo à forma padrão usando $px = xp - i\hbar$ e $xp = px + i\hbar$:

$$xpxp = x(xp - i\hbar)p = x^2 p^2 - i\hbar xp.$$

Façamos cada redução de forma sistemática, deslocando todos os p para a direita. Usando $px = xp - i\hbar$ repetidamente:

$$\begin{aligned} xppx &= xp(px) = xp(xp - i\hbar) = x(px)p - i\hbar xp = x(xp - i\hbar)p - i\hbar xp = x^2 p^2 - 2i\hbar xp, \\ pxxp &= (px)xp = (xp - i\hbar)xp = x(px)p - i\hbar xp = x(xp - i\hbar)p - i\hbar xp = x^2 p^2 - 2i\hbar xp, \\ ppxx &= (px)(px) = (xp - i\hbar)(xp - i\hbar) = xpxp - 2i\hbar xp + (i\hbar)^2 = x^2 p^2 - i\hbar xp - 2i\hbar xp - \hbar^2 \\ &= x^2 p^2 - 3i\hbar xp - \hbar^2, \end{aligned}$$

onde na última linha usamos $xpxp = x^2 p^2 - i\hbar xp$ (primeira redução acima). Somando os quatro termos:

$$(xp + px)^2 = 4x^2 p^2 - 8i\hbar xp - \hbar^2.$$

Analogamente, reduzimos $p^2 x^2$:

$$\begin{aligned} p^2 x^2 &= p(px)x = p(xp - i\hbar)x = (px)(px) - i\hbar px = (x^2 p^2 - 3i\hbar xp - \hbar^2) - i\hbar(xp - i\hbar) \\ &= x^2 p^2 - 4i\hbar xp - 2\hbar^2. \end{aligned}$$

Portanto

$$\begin{aligned}x^2 p^2 + p^2 x^2 &= 2 x^2 p^2 - 4i\hbar xp - 2\hbar^2, \\ \frac{1}{2}(xp + px)^2 &= 2 x^2 p^2 - 4i\hbar xp - \frac{1}{2}\hbar^2,\end{aligned}$$

e a diferença é um puro c -número de ordem $\hbar^2$:

$$\Delta = x^2 p^2 + p^2 x^2 - \frac{1}{2} (xp + px)^2 = -\frac{3}{2} \hbar^2.$$

Os termos dependentes de x e p (inclusive os de ordem $\hbar$) cancelam-se identicamente; os dois ordenamentos simetrizados do produto clássico $x^2 p^2$ coincidem, portanto, a menos de uma constante múltipla de $\hbar^2$, que desaparece no limite clássico $\hbar \rightarrow 0$. Isso ilustra a ambiguidade intrínseca, de ordem $\hbar^2$, da regra de quantização por simetrização. $\square$

Questão 12 — Limite clássico: comutador e colchete de Poisson

(Merzbacher, Ex. 14.6)

Queremos ilustrar a correspondência (Eq. 14.60 de Merzbacher)

$$\frac{1}{i\hbar}[F, G] \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} \{F, G\},$$

com a convenção de Poisson declarada como

$$\{F, G\} \equiv \frac{\partial F}{\partial x} \frac{\partial G}{\partial p_x} - \frac{\partial F}{\partial p_x} \frac{\partial G}{\partial x},$$

tomando $F = p_x^2$ e $G = x^2$, com $[x, p_x] = i\hbar$.

(i) Comutador quântico $[p_x^2, x^2]$

Usamos repetidamente a identidade $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$. Primeiro,

$$[p_x, x^2] = x[p_x, x] + [p_x, x]x = x(-i\hbar) + (-i\hbar)x = -2i\hbar x,$$

pois $[p_x, x] = -[x, p_x] = -i\hbar$. Então

$$\begin{aligned} [p_x^2, x^2] &= p_x[p_x, x^2] + [p_x, x^2]p_x \\ &= p_x(-2i\hbar x) + (-2i\hbar x)p_x \\ &= -2i\hbar(p_x x + x p_x). \end{aligned}$$

Para exibir a correção quântica explicitamente, escrevemos $p_x x = x p_x - i\hbar$, de modo que $p_x x + x p_x = 2x p_x - i\hbar$ e

$$\boxed{[p_x^2, x^2] = -2i\hbar(x p_x + p_x x) = -4i\hbar x p_x - 2\hbar^2}$$

(equivalentemente, $= -4i\hbar p_x x + 2\hbar^2$). Dividindo por $i\hbar$:

$$\frac{1}{i\hbar}[p_x^2, x^2] = -2(x p_x + p_x x) = -4x p_x + 2i\hbar.$$

No limite clássico $\hbar \rightarrow 0$ os operadores x e p_x passam a comutar (a ordem torna-se irrelevante) e o termo $2i\hbar$ — proveniente da correção $-2\hbar^2$ dentro do comutador — desaparece:

$$\frac{1}{i\hbar}[p_x^2, x^2] \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} -2(x p_x + p_x x)|_{\text{clássico}} = -4x p_x.$$

(ii) Colchete de Poisson clássico

Com $F = p_x^2$ e $G = x^2$ na convenção declarada:

$$\begin{aligned} \{p_x^2, x^2\} &= \frac{\partial(p_x^2)}{\partial x} \frac{\partial(x^2)}{\partial p_x} - \frac{\partial(p_x^2)}{\partial p_x} \frac{\partial(x^2)}{\partial x} \\ &= (0)(0) - (2p_x)(2x) \\ &= -4x p_x. \end{aligned}$$

Comparação

$$\frac{1}{i\hbar}[p_x^2, x^2] = -4x p_x + 2i\hbar \quad \text{vs.} \quad \{p_x^2, x^2\} = -4x p_x.$$

As duas expressões coincidem exatamente no limite $\hbar \rightarrow 0$: o termo $-2\hbar^2$ no comutador (isto é, $+2i\hbar$ após dividir por $i\hbar$) é a correção puramente quântica, de ordem superior em $\hbar$, que desaparece no limite clássico. Isso ilustra a Eq. (14.60), $\frac{1}{i\hbar}[F, G] \rightarrow \{F, G\}$, no caso $F = p_x^2$, $G = x^2$, com todos os sinais consistentes com $[x, p_x] = i\hbar$ e com a convenção de Poisson adotada. $\square$

Questão 13 — Mistura de dois estados não ortogonais e entropias

(Ex. 15.24 e Ex. 15.25 de Merzbacher)

a) Autovalores de $\rho = p_1 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + p_2 |\psi_2\rangle\langle\psi_2|$

Sejam $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ normalizados, não ortogonais, com superposição $C \equiv \langle\psi_1|\psi_2\rangle$, e $p_1 + p_2 = 1$, $p_{1,2} \geq 0$. O operador

$$\rho = p_1 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + p_2 |\psi_2\rangle\langle\psi_2|$$

atua de forma não trivial apenas no subespaço bidimensional $\mathcal{V} = \text{span}\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$: qualquer vetor ortogonal a ambos é aniquilado por ρ , de modo que todos os demais autovalores são nulos. Restringamo-nos, pois, a $\mathcal{V}$.

Em $\mathcal{V}$, ρ é hermitiano com dois autovalores $\bar{p}_1, \bar{p}_2$. O polinômio característico de um operador 2×2 é

$$\lambda^2 - (\text{Tr } \rho) \lambda + \det \rho = 0, \quad \det \rho = \frac{1}{2} [(\text{Tr } \rho)^2 - \text{Tr } \rho^2],$$

logo basta calcular $\text{Tr } \rho$ e $\text{Tr } \rho^2$.

Traços. Como $\text{Tr } |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = 1$,

$$\text{Tr } \rho = p_1 + p_2 = 1.$$

Para ρ^2 , usando $|\psi_i\rangle\langle\psi_i| |\psi_j\rangle\langle\psi_j| = \langle\psi_i|\psi_j\rangle |\psi_i\rangle\langle\psi_j|$ e $\text{Tr } |\psi_i\rangle\langle\psi_j| = \langle\psi_j|\psi_i\rangle$,

$$\begin{aligned} \text{Tr } \rho^2 &= p_1^2 + p_2^2 + p_1 p_2 \text{Tr} (|\psi_1\rangle\langle\psi_1| |\psi_2\rangle\langle\psi_2|) + p_1 p_2 \text{Tr} (|\psi_2\rangle\langle\psi_2| |\psi_1\rangle\langle\psi_1|) \\ &= p_1^2 + p_2^2 + 2p_1 p_2 |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2 \\ &= (p_1 + p_2)^2 - 2p_1 p_2 (1 - |C|^2) \\ &= 1 - 2p_1 p_2 (1 - |C|^2). \end{aligned}$$

Portanto

$$\det \rho = \frac{1}{2} [1 - \text{Tr } \rho^2] = p_1 p_2 (1 - |C|^2),$$

e o polinômio característico fica

$$\lambda^2 - \lambda + p_1 p_2 (1 - |C|^2) = 0.$$

Suas raízes são

$$\bar{p}_{1,2} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \sqrt{1 - 4p_1 p_2 (1 - |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2)} \right]$$

Como $4p_1 p_2 \leq (p_1 + p_2)^2 = 1$ e $0 \leq 1 - |C|^2 \leq 1$, o radicando está em $[0, 1]$: os autovalores são reais, satisfazem $0 \leq \bar{p}_{1,2} \leq 1$ e $\bar{p}_1 + \bar{p}_2 = 1$, como deve ser para um operador densidade.

Verificações de consistência: se $C = 0$ (estados ortogonais), $\bar{p}_{1,2} = \frac{1}{2}(1 \pm |p_1 - p_2|) = \{p_1, p_2\}$; se $|C| = 1$ (estados iguais a menos de fase), $\bar{p}_{1,2} = \{1, 0\}$ e ρ é puro. $\square$

b) Entropia de mistura $H(\mathcal{E})$ versus entropia de von Neumann $S(\rho)$

Tome agora a mistura equiprovável $p_1 = p_2 = \frac{1}{2}$. A entropia de Shannon da preparação (entropia de mistura do ensemble $\mathcal{E}$) é

$$H(\mathcal{E}) = -p_1 \ln p_1 - p_2 \ln p_2 = -\frac{1}{2} \ln \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \ln \frac{1}{2} = \ln 2,$$

independentemente da superposição C : ela mede apenas a ignorância sobre qual estado foi preparado.

Já a entropia de von Neumann depende dos autovalores de ρ . Com $p_1 p_2 = \frac{1}{4}$, o resultado do item (a) dá

$$\bar{p}_{1,2} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \sqrt{1 - (1 - |C|^2)} \right] = \frac{1 \pm |C|}{2},$$

e portanto

$$\begin{aligned} S(\rho) &= -\text{Tr}(\rho \ln \rho) = -\bar{p}_1 \ln \bar{p}_1 - \bar{p}_2 \ln \bar{p}_2 \\ &= -\frac{1+|C|}{2} \ln \frac{1+|C|}{2} - \frac{1-|C|}{2} \ln \frac{1-|C|}{2}. \end{aligned}$$

Comparação para $0 \leq |C| \leq 1$. A função $s(\lambda) = -\lambda \ln \lambda - (1 - \lambda) \ln(1 - \lambda)$, com $\lambda = \bar{p}_1 = (1 + |C|)/2 \in [\frac{1}{2}, 1]$, é estritamente decrescente nesse intervalo, com máximo $\ln 2$ em $\lambda = \frac{1}{2}$. Logo:

- $S(\rho) \leq H(\mathcal{E}) = \ln 2$ para todo C , com igualdade *somente* quando $C = 0$ (estados ortogonais): a superposição não nula torna os dois membros do ensemble parcialmente indistinguíveis, e a informação acessível é menor do que a incerteza da preparação.
- Quando $|C| \rightarrow 1$, temos $\bar{p}_1 \rightarrow 1$, $\bar{p}_2 \rightarrow 0$ e, usando $\lim_{x \rightarrow 0^+} x \ln x = 0$,

$$S(\rho) \rightarrow 0.$$

De fato, nesse limite os dois estados coincidem a menos de fase, ρ é puro e não há mistura física alguma, embora $H(\mathcal{E}) = \ln 2$ continue registrando a ignorância (agora irrelevante) sobre o rótulo da preparação.

- Quando $C \rightarrow 0$, $\bar{p}_{1,2} \rightarrow \frac{1}{2}$ e

$$S(\rho) \rightarrow \ln 2 = H(\mathcal{E}) :$$

com estados ortogonais, e portanto perfeitamente distinguíveis, a entropia de von Neumann atinge a entropia de mistura, e toda a incerteza da preparação é fisicamente acessível.

Em resumo, $S(\rho)$ interpola monotonicamente entre $\ln 2$ (em $C = 0$) e 0 (em $|C| = 1$), sempre com $S \leq H$ — ilustração do fato geral de que a entropia de von Neumann é limitada superiormente pela entropia de Shannon de qualquer ensemble que realize ρ . $\square$

Questão 14 — Potencial delta atrativo na representação de momento

(Merzbacher, Problema 9.2)

Consideremos uma partícula de massa m no potencial

$$V(x) = -g \delta(x), \quad g > 0,$$

e busquemos o estado ligado ($E < 0$) trabalhando inteiramente na representação de momento.

Equação de Schrödinger em p -space

Seja $\phi(p) = \langle p | \psi \rangle$. A equação de autovalores $\left(\frac{p^2}{2m} + V\right) |\psi\rangle = E |\psi\rangle$ projetada em $\langle p |$ dá

$$\frac{p^2}{2m} \phi(p) + \int_{-\infty}^{\infty} dp' \langle p | V | p' \rangle \phi(p') = E \phi(p).$$

O núcleo do potencial calcula-se com $\langle x | p \rangle = e^{ipx/\hbar} / \sqrt{2\pi\hbar}$:

$$\langle p | V | p' \rangle = \int dx \langle p | x \rangle [-g \delta(x)] \langle x | p' \rangle = -\frac{g}{2\pi\hbar} \int dx \delta(x) e^{i(p'-p)x/\hbar} = -\frac{g}{2\pi\hbar}.$$

O núcleo é constante (separável), de modo que a equação integral fica

$$\frac{p^2}{2m} \phi(p) - \frac{g}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p') dp' = E \phi(p).$$

Solução e condição de autoconsistência

Para estado ligado escrevemos $E = -|E|$ e definimos a constante

$$C \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p') dp'.$$

Como $\frac{p^2}{2m} + |E| > 0$ para todo p , podemos isolar ϕ :

$$\phi(p) = \frac{g}{2\pi\hbar} \frac{C}{\frac{p^2}{2m} + |E|}.$$

Integrando ambos os lados em p e cancelando $C \neq 0$ (senão $\phi \equiv 0$), obtemos a condição de autoconsistência

$$1 = \frac{g}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\frac{p^2}{2m} + |E|} = \frac{gm}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{p^2 + 2m|E|}.$$

Com $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{p^2 + a^2} = \frac{\pi}{a}$, $a = \sqrt{2m|E|}$:

$$1 = \frac{gm}{\pi\hbar} \cdot \frac{\pi}{\sqrt{2m|E|}} = \frac{gm}{\hbar\sqrt{2m|E|}} \implies \sqrt{2m|E|} = \frac{mg}{\hbar} \implies \boxed{E = -\frac{mg^2}{2\hbar^2}}.$$

A condição admite *uma única* solução para $|E|$ (o lado direito de $1 = gm/\hbar\sqrt{2m|E|}$ é monótono decrescente em $|E|$), logo há exatamente um estado ligado.

Autofunção em p e retorno à representação de posição

Definindo $\kappa \equiv \sqrt{2m|E|}/\hbar = mg/\hbar^2$, a autofunção em momento é

$$\phi(p) = \frac{gC}{2\pi\hbar} \frac{2m}{p^2 + \hbar^2\kappa^2} = \mathcal{N} \frac{1}{p^2 + \hbar^2\kappa^2},$$

com $\mathcal{N}$ fixado pela normalização $\int |\phi|^2 dp = 1$. Usando $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{(p^2+b^2)^2} = \frac{\pi}{2b^3}$ com $b = \hbar\kappa$:

$$|\mathcal{N}|^2 \frac{\pi}{2\hbar^3\kappa^3} = 1 \quad \Rightarrow \quad \mathcal{N} = \sqrt{\frac{2\hbar^3\kappa^3}{\pi}}, \quad \phi(p) = \sqrt{\frac{2\hbar^3\kappa^3}{\pi}} \frac{1}{p^2 + \hbar^2\kappa^2}.$$

A função de onda em x é a transformada inversa:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{ipx/\hbar} \phi(p) = \sqrt{\frac{\hbar^2\kappa^3}{\pi^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ipx/\hbar}}{p^2 + \hbar^2\kappa^2} dp.$$

A integral é padrão (resíduos, fechando o contorno no semiplano superior para $x > 0$ e inferior para $x < 0$):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ipx/\hbar}}{p^2 + \hbar^2\kappa^2} dp = \frac{\pi}{\hbar\kappa} e^{-\kappa|x|}.$$

Logo

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{\hbar^2\kappa^3}{\pi^2}} \cdot \frac{\pi}{\hbar\kappa} e^{-\kappa|x|} = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x|},$$

e, substituindo $\kappa = mg/\hbar^2$,

$$\boxed{\psi(x) = \sqrt{\frac{mg}{\hbar^2}} \exp\left(-\frac{mg|x|}{\hbar^2}\right), \quad E = -\frac{mg^2}{2\hbar^2}.$$

Verifica-se de imediato $\int |\psi|^2 dx = \kappa \cdot \frac{2}{2\kappa} = 1$.

Comparação com o cálculo na representação de posição

Na Seção 6.4 do Merzbacher o mesmo problema é resolvido em x -space: para $x \neq 0$ a equação livre dá $\psi \propto e^{-\kappa|x|}$, e a descontinuidade da derivada imposta pela delta, $\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2mg}{\hbar^2}\psi(0)$, fixa $\kappa = mg/\hbar^2$, isto é, $E = -mg^2/2\hbar^2$, com um único estado ligado, par. É exatamente o que obtivemos: a representação de momento converte a condição de salto da derivada na condição algébrica de autoconsistência $1 = \frac{g}{2\pi\hbar} \int dp (p^2/2m + |E|)^{-1}$, e ambas as vias produzem o mesmo espectro e a mesma autofunção. $\square$

Questão 15 — Teorema do virial

(P.3.10.a,b, complemento de exercícios do Cap. III, Cohen-Tannoudji, Diu & Laloë, Vol. 1)

Enunciado (resumido). a) Em um problema unidimensional com hamiltoniano $H = p^2/2m + V(x)$, considere o operador $A = \frac{1}{2}(xp + px)$. Calcule o comutador $[H, A]$ e mostre que, em um estado estacionário $|\varphi\rangle$ de H , vale $\langle\varphi|[H, A]|\varphi\rangle = 0$; deduza o teorema do virial $2\langle T\rangle = \langle x \, dV/dx\rangle$, e o caso particular $V(x) = \lambda x^n$. b) Generalize para três dimensões, com $A = \frac{1}{2}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})$, obtendo $2\langle T\rangle = \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V\rangle$; aplique a potenciais homogêneos de grau n e aos casos do oscilador harmônico e do potencial coulombiano.

a) Caso unidimensional

Escolhemos o operador hermitiano

$$A = \frac{1}{2}(xp + px) = xp - \frac{i\hbar}{2},$$

onde usamos $[x, p] = i\hbar$. Como A difere de xp apenas por uma constante multiplicativa da identidade, temos

$$[H, A] = [H, xp].$$

Calculemos $[H, xp]$ com $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, usando a regra de Leibniz $[H, xp] = [H, x]p + x[H, p]$.

Primeiro termo. Como $V(x)$ comuta com x ,

$$[H, x] = \frac{1}{2m}[p^2, x] = \frac{1}{2m}(p[p, x] + [p, x]p) = \frac{1}{2m}(-i\hbar p - i\hbar p) = -\frac{i\hbar}{m}p.$$

Segundo termo. Como p^2 comuta com p , e $[V(x), p] = i\hbar \frac{dV}{dx}$ (consequência de $[x, p] = i\hbar$ e da expansão de V em potências de x , ou diretamente na representação de posição, pois $[V, p]\psi = -\frac{\hbar}{i}[V\psi' - (V\psi)'] = \frac{\hbar}{i}V'\psi$),

$$[H, p] = [V(x), p] = i\hbar \frac{dV}{dx}.$$

Portanto,

$$\boxed{[H, A] = -\frac{i\hbar}{m}p^2 + i\hbar x \frac{dV}{dx} = i\hbar \left(x \frac{dV}{dx} - 2T \right)} \quad \text{com } T = \frac{p^2}{2m}.$$

Seja agora $|\varphi\rangle$ um autoestado estacionário de H , $H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$, normalizado. Então

$$\begin{aligned} \langle\varphi|[H, A]|\varphi\rangle &= \langle\varphi|HA|\varphi\rangle - \langle\varphi|AH|\varphi\rangle \\ &= E\langle\varphi|A|\varphi\rangle - E\langle\varphi|A|\varphi\rangle = 0, \end{aligned}$$

onde usamos $H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$ e, por hermiticidade de H , $\langle\varphi|H = E\langle\varphi|$. (Este é o argumento geral: o valor médio do comutador de H com qualquer operador se anula em estado estacionário; equivalentemente, $d\langle A\rangle/dt = \frac{1}{i\hbar}\langle[A, H]\rangle = 0$.)

Tomando o valor médio da expressão do comutador,

$$0 = \langle\varphi|[H, A]|\varphi\rangle = i\hbar \left(\langle x \frac{dV}{dx} \rangle - 2\langle T \rangle \right) \implies \boxed{2\langle T \rangle = \langle x \frac{dV}{dx} \rangle}$$

que é o teorema do virial em uma dimensão.

Caso $V(x) = \lambda x^n$. Então $x \, dV/dx = n\lambda x^n = nV(x)$, e portanto

$$2\langle T \rangle = n\langle V \rangle.$$

□

b) Caso tridimensional

Agora $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$ e tomamos

$$A = \frac{1}{2}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) = \sum_{j=1}^3 \frac{1}{2}(x_j p_j + p_j x_j) = \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} - \frac{3i\hbar}{2},$$

usando $[x_j, p_k] = i\hbar \delta_{jk}$. De novo $[H, A] = [H, \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}]$, e o cálculo é a soma, componente a componente, do cálculo unidimensional:

$$\begin{aligned} [H, x_j p_j] &= [H, x_j] p_j + x_j [H, p_j], \\ [H, x_j] &= \frac{1}{2m} [\mathbf{p}^2, x_j] = -\frac{i\hbar}{m} p_j, \\ [H, p_j] &= [V(\mathbf{r}), p_j] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x_j}. \end{aligned}$$

Somando em j :

$$[H, A] = i\hbar \left(\mathbf{r} \cdot \nabla V - \frac{\mathbf{p}^2}{m} \right) = i\hbar (\mathbf{r} \cdot \nabla V - 2T).$$

Em um estado estacionário $|\varphi\rangle$, o mesmo argumento do item (a) dá $\langle\varphi|[H, A]|\varphi\rangle = 0$, logo

$$\boxed{2\langle T \rangle = \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V \rangle}.$$

Potencial homogêneo de grau n . Se $V(\alpha\mathbf{r}) = \alpha^n V(\mathbf{r})$ para todo $\alpha > 0$, o teorema de Euler das funções homogêneas dá $\mathbf{r} \cdot \nabla V = nV$ (basta derivar a relação de homogeneidade em α e pôr $\alpha = 1$). Portanto

$$2\langle T \rangle = n\langle V \rangle.$$

Exemplos.

(i) **Oscilador harmônico**, $V = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ ($n = 2$):

$$\langle T \rangle = \langle V \rangle = \frac{E}{2},$$

pois $E = \langle T \rangle + \langle V \rangle$: a energia se reparte igualmente entre cinética e potencial.

(ii) **Potencial coulombiano**, $V = -\frac{e^2}{r}$ ($n = -1$):

$$2\langle T \rangle = -\langle V \rangle \implies E = \langle T \rangle + \langle V \rangle = -\langle T \rangle = \frac{\langle V \rangle}{2}.$$

Como $\langle T \rangle > 0$, os estados ligados têm $E < 0$, em acordo com o espectro do átomo de hidrogênio.

□

Questão 16 — Densidade de corrente de probabilidade

(P.3.8 e P.3.9, complemento de exercícios do Cap. III, Cohen-Tannoudji, Diu & Laloë, Vol. 1)

Enunciado (resumido). a) A partir da equação de Schrödinger dependente do tempo, deduza a equação de continuidade $\partial\rho/\partial t + \partial J/\partial x = 0$, com $\rho = |\psi|^2$ e $J = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x} \right)$. Calcule ρ e J para a superposição de ondas planas $\psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{-i(kx + \omega t)}$ (onda incidente mais onda refletida) e discuta os termos de interferência. b) Mostre que, escrevendo $\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) e^{i\theta(\mathbf{r})}$ com φ e θ reais, a corrente é $\mathbf{J} = \frac{\hbar}{m} \varphi^2 \nabla\theta$; aplique à onda plana $\psi = A e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$.

a) Equação de continuidade e superposição incidente + refletida

Dedução da equação de continuidade. Para uma partícula em uma dimensão, a equação de Schrödinger e sua conjugada são

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x) \psi, \\ -i\hbar \frac{\partial\psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} + V(x) \psi^*, \end{aligned}$$

com V real. Multiplicando a primeira por ψ^* , a segunda por ψ , e subtraindo:

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \psi \frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} \right).$$

O lado esquerdo é $i\hbar \partial|\psi|^2/\partial t$; os termos de potencial se cancelam. O lado direito é uma derivada total:

$$\psi^* \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \psi \frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial x} \right).$$

Logo, definindo

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2, \quad J(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x} \right),$$

obtemos a equação de continuidade

$$\boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0},$$

que expressa a conservação local da probabilidade.

Superposição de ondas incidente e refletida. Considere a partícula livre com

$$\psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{-i(kx + \omega t)} = \left(A e^{ikx} + B e^{-ikx} \right) e^{-i\omega t}, \quad \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}.$$

Como o fator temporal é global, ρ e J são independentes do tempo (estado estacionário). A densidade é

$$\begin{aligned} \rho(x) &= \left| A e^{ikx} + B e^{-ikx} \right|^2 \\ &= |A|^2 + |B|^2 + AB^* e^{2ikx} + A^* B e^{-2ikx} \\ &= |A|^2 + |B|^2 + 2|A||B| \cos(2kx + \alpha), \end{aligned}$$

onde escrevemos $AB^* = |A||B|e^{i\alpha}$. Os termos cruzados produzem uma *modulação espacial estacionária* de período π/k (figura de interferência entre a onda incidente e a refletida), estacionária no tempo porque as duas ondas têm a mesma frequência ω .

Para a corrente, calculemos exatamente. Com $u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$,

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = ik(Ae^{ikx} - Be^{-ikx})e^{-i\omega t},$$

e

$$\begin{aligned}\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} &= ik(A^*e^{-ikx} + B^*e^{ikx})(Ae^{ikx} - Be^{-ikx}) \\ &= ik[|A|^2 - |B|^2 - A^*B e^{-2ikx} + AB^* e^{2ikx}] \\ &= ik[|A|^2 - |B|^2 + 2i \operatorname{Im}(AB^* e^{2ikx})].\end{aligned}$$

Tomando a parte imaginária:

$$\operatorname{Im}\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x}\right) = k(|A|^2 - |B|^2),$$

pois o termo $ik \cdot 2i \operatorname{Im}(\dots) = -2k \operatorname{Im}(AB^* e^{2ikx})$ é *real* e não contribui para a parte imaginária. Portanto,

$$J = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2),$$

independente de x e de t .

Discussão. A conta acima é exata: os termos cruzados (de interferência) se cancelam *identicamente* na corrente — não é preciso nenhuma média temporal ou espacial. A razão é que a contribuição cruzada a $\psi^* \partial_x \psi$ é puramente imaginária vezes ik , isto é, real, e a corrente só retém a parte imaginária. Fisicamente: a corrente líquida é a diferença entre o fluxo incidente $(\hbar k/m)|A|^2$ e o fluxo refletido $(\hbar k/m)|B|^2$, exatamente como se as duas ondas transportassem probabilidade de forma independente — embora a *densidade* ρ exiba interferência. Isso é consistente com a equação de continuidade: como ρ é independente de t , deve valer $\partial J / \partial x = 0$, ou seja, J constante, como encontrado. No caso particular $|B| = |A|$ (reflexão total, e.g. parede impenetrável), $J = 0$ e $\rho \propto \cos^2(kx + \alpha/2)$: onda estacionária pura, sem transporte líquido de probabilidade. $\square$

b) Corrente e gradiente da fase

Em três dimensões, a densidade de corrente é

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}[\psi^*(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r})].$$

Escrevamos a função de onda em forma polar, $\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) e^{i\theta(\mathbf{r})}$, com $\varphi \geq 0$ e θ reais. Então

$$\nabla \psi = (\nabla \varphi) e^{i\theta} + i\varphi (\nabla \theta) e^{i\theta},$$

e

$$\psi^* \nabla \psi = \varphi e^{-i\theta} [\nabla \varphi + i\varphi \nabla \theta] e^{i\theta} = \varphi \nabla \varphi + i\varphi^2 \nabla \theta.$$

O primeiro termo é real; a parte imaginária é $\varphi^2 \nabla \theta$. Logo,

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{m} \varphi^2 \nabla \theta = \rho \mathbf{v}, \quad \mathbf{v}(\mathbf{r}) \equiv \frac{\hbar}{m} \nabla \theta(\mathbf{r}),$$

com $\rho = \varphi^2$. A corrente é, portanto, proporcional ao *gradiente da fase*: o módulo φ determina onde a partícula está, mas é a variação espacial da fase que transporta probabilidade — uma função de onda de fase constante (a menos de fator global), em particular real, tem corrente nula. O campo $\mathbf{v} = (\hbar/m)\nabla\theta$ tem a interpretação de velocidade local do "fluido" de probabilidade, e $\mathbf{J} = \rho\mathbf{v}$ é a forma hidrodinâmica usual.

Aplicação: onda plana. Para $\psi(\mathbf{r}) = Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, escrevendo $A = |A|e^{i\chi}$ temos $\varphi = |A|$ e $\theta(\mathbf{r}) = \mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + \chi$, donde $\nabla\theta = \mathbf{k}$ e

$$\rho = |A|^2, \quad \mathbf{J} = |A|^2 \frac{\hbar\mathbf{k}}{m} = \rho\mathbf{v}, \quad \mathbf{v} = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m} = \frac{\mathbf{p}}{m},$$

isto é, densidade uniforme fluindo com a velocidade de grupo clássica $\mathbf{p}/m$ associada ao momento $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. □

Questão 17 — Operador densidade

(P.3.17, P.3.18 e P.3.19, Cohen-Tannoudji)

Exercício 17: propriedades gerais e evolução de ρ

Enunciado (resumido). Seja ρ o operador densidade de um sistema arbitrário, com autovetores $|\chi_l\rangle$ e autovalores π_l . Mostre que $\text{Tr } \rho^2 \leq 1$, com igualdade se e somente se ρ descreve um estado puro; mostre que ρ é puro se e somente se $\rho^2 = \rho$; escreva a equação de evolução de ρ e mostre que $\text{Tr } \rho^2$ é constante no tempo.

Solução.

(a) $\text{Tr } \rho^2 \leq 1$. O operador densidade é hermitiano, positivo e de traço unitário. Na sua base própria,

$$\rho = \sum_l \pi_l |\chi_l\rangle\langle\chi_l|, \quad \pi_l \geq 0, \quad \sum_l \pi_l = 1.$$

Então

$$\text{Tr } \rho^2 = \sum_l \pi_l^2.$$

Como $0 \leq \pi_l \leq 1$ (cada π_l é não negativo e a soma de todos vale 1), temos $\pi_l^2 \leq \pi_l$, logo

$$\text{Tr } \rho^2 = \sum_l \pi_l^2 \leq \sum_l \pi_l = 1.$$

A igualdade ocorre se e somente se $\pi_l^2 = \pi_l$ para todo l , isto é, $\pi_l \in \{0, 1\}$. Como $\sum_l \pi_l = 1$, exatamente um autovalor vale 1 e os demais são nulos:

$$\rho = |\chi_{l_0}\rangle\langle\chi_{l_0}|,$$

ou seja, ρ é o projetor sobre um único vetor de estado — um estado puro.

(b) ρ puro $\iff \rho^2 = \rho$. Se $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ com $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, então

$$\rho^2 = |\psi\rangle\langle\psi| |\psi\rangle\langle\psi| = \langle\psi|\psi\rangle |\psi\rangle\langle\psi| = \rho.$$

Reciprocamente, se $\rho^2 = \rho$, então na base própria $\pi_l^2 = \pi_l$, isto é, $\pi_l \in \{0, 1\}$; a condição $\text{Tr } \rho = 1$ força um único $\pi_{l_0} = 1$, e $\rho = |\chi_{l_0}\rangle\langle\chi_{l_0}|$ é um projetor de posto 1, ou seja, um estado puro. Note que isso equivale a $\text{Tr } \rho^2 = 1$.

(c) **Evolução temporal e conservação da pureza.** Para um estado puro $|\psi(t)\rangle$ obedecendo à equação de Schrödinger, $\rho = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ satisfaz

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\rho}{dt} &= i\hbar \left(\frac{d|\psi\rangle}{dt} \right) \langle\psi| + i\hbar |\psi\rangle \left(\frac{d\langle\psi|}{dt} \right) \\ &= H |\psi\rangle\langle\psi| - |\psi\rangle\langle\psi| H = [H, \rho], \end{aligned}$$

e por linearidade da mistura estatística ($\rho = \sum_k p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$, com pesos p_k constantes) a mesma equação vale para ρ geral:

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [H(t), \rho(t)] \quad (\text{equação de von Neumann}).$$

Agora,

$$\frac{d}{dt} \text{Tr} \rho^2 = \text{Tr} \left(\frac{d\rho}{dt} \rho + \rho \frac{d\rho}{dt} \right) = 2 \text{Tr} \left(\rho \frac{d\rho}{dt} \right) = \frac{2}{i\hbar} \text{Tr} (\rho [H, \rho]) = \frac{2}{i\hbar} \text{Tr} (\rho H \rho - \rho^2 H).$$

Pela ciclicidade do traço, $\text{Tr}(\rho H \rho) = \text{Tr}(\rho^2 H)$, logo

$$\frac{d}{dt} \text{Tr} \rho^2 = 0.$$

A pureza $\text{Tr} \rho^2$ é, portanto, uma constante do movimento: a evolução unitária (hamiltoniana) jamais transforma um estado puro em mistura, nem o contrário. $\square$

Exercício 18: operadores densidade reduzidos e correlações

Enunciado (resumido). Um sistema global é composto de dois subsistemas (1) e (2); seja ρ o operador densidade global e defina os operadores reduzidos $\rho(1) = \text{Tr}_2 \rho$ e $\rho(2) = \text{Tr}_1 \rho$. Mostre que: (a) $\text{Tr}_1 \rho(1) = 1$; (b) $\langle A(1) \rangle = \text{Tr} [\rho(1) A(1)]$ para todo observável $A(1)$ agindo apenas no subsistema 1; (c) se $\rho = \rho(1) \otimes \rho(2)$, os subsistemas são descorrelacionados; (d) em geral $\rho(1)$ descreve um estado misto mesmo quando ρ é puro.

Solução. Sejam $\{|u_m\rangle\}$ e $\{|v_n\rangle\}$ bases ortonormais dos espaços $\mathcal{E}_1$ e $\mathcal{E}_2$. Por definição,

$$\langle u_m | \rho(1) | u_{m'} \rangle = \sum_n \langle u_m v_n | \rho | u_{m'} v_n \rangle.$$

(a) **Normalização.**

$$\text{Tr}_1 \rho(1) = \sum_m \langle u_m | \rho(1) | u_m \rangle = \sum_{m,n} \langle u_m v_n | \rho | u_m v_n \rangle = \text{Tr} \rho = 1.$$

Além disso $\rho(1)$ é hermitiano e positivo (herda essas propriedades de ρ , pois $\langle \varphi | \rho(1) | \varphi \rangle = \sum_n \langle \varphi v_n | \rho | \varphi v_n \rangle \geq 0$); logo é um operador densidade legítimo.

(b) **Valores médios de observáveis do subsistema 1.** Para $\tilde{A} = A(1) \otimes \mathbb{1}(2)$,

$$\begin{aligned} \langle A(1) \rangle &= \text{Tr} (\rho \tilde{A}) = \sum_{m,n} \sum_{m',n'} \langle u_m v_n | \rho | u_{m'} v_{n'} \rangle \langle u_{m'} v_{n'} | A(1) \otimes \mathbb{1} | u_m v_n \rangle \\ &= \sum_{m,m'} \left[\sum_n \langle u_m v_n | \rho | u_{m'} v_n \rangle \right] \langle u_{m'} | A(1) | u_m \rangle \\ &= \sum_{m,m'} \langle u_m | \rho(1) | u_{m'} \rangle \langle u_{m'} | A(1) | u_m \rangle = \text{Tr}_1 [\rho(1) A(1)], \end{aligned}$$

onde usamos $\langle v_{n'} | \mathbb{1} | v_n \rangle = \delta_{nn'}$. Assim, $\rho(1)$ contém toda a informação necessária para prever resultados de medidas feitas apenas no subsistema 1.

(c) **Estado produto $\Rightarrow$ ausência de correlações.** Se $\rho = \rho(1) \otimes \rho(2)$, então, para observáveis $A(1)$ e $B(2)$,

$$\begin{aligned} \langle A(1) B(2) \rangle &= \text{Tr} [(\rho(1) \otimes \rho(2))(A(1) \otimes B(2))] = \text{Tr} [\rho(1) A(1) \otimes \rho(2) B(2)] \\ &= \text{Tr}_1 [\rho(1) A(1)] \text{Tr}_2 [\rho(2) B(2)] = \langle A(1) \rangle \langle B(2) \rangle, \end{aligned}$$

pois o traço de um produto tensorial fatora. Todas as funções de correlação fatoram: os subsistemas são estatisticamente independentes. (Verifica-se também que, nesse caso, $\text{Tr}_2 \rho = \rho(1)$ e $\text{Tr}_1 \rho = \rho(2)$, de modo que a notação é consistente.)

(d) $\rho(1)$ é em geral misto, mesmo com ρ puro. Considere dois sistemas de dois níveis, com bases $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, no estado puro emaranhado

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle), \quad \rho = |\psi\rangle\langle\psi|.$$

Explicitamente,

$$\rho = \frac{1}{2}(|+-\rangle\langle+-| + |+-\rangle\langle-+| + |-+\rangle\langle+-| + |-+\rangle\langle-+|).$$

Tomando o traço parcial sobre o subsistema 2 (apenas os termos diagonais no índice 2 sobrevivem):

$$\rho(1) = \text{Tr}_2 \rho = \frac{1}{2}(|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|) = \frac{\mathbb{1}}{2}.$$

Então $\rho(1)^2 = \mathbb{1}/4 \neq \rho(1)$ e $\text{Tr} \rho(1)^2 = \frac{1}{2} < 1$: o estado reduzido é uma mistura estatística (de fato, a mistura maximamente desordenada), embora o estado global seja puro com $\text{Tr} \rho^2 = 1$. A informação “perdida” está nas correlações (emaranhamento) entre os dois subsistemas, inacessíveis a medidas locais. Em geral, $\rho(1)$ é puro somente quando $|\psi\rangle$ é um produto tensorial $|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$. $\square$

Exercício 19: evolução do operador densidade reduzido

Enunciado (resumido). O sistema global do exercício anterior evolui com hamiltoniano H . Mostre que, se $H = H(1) \otimes \mathbb{1}(2) + \mathbb{1}(1) \otimes H(2)$ (subsistemas sem interação), então $\rho(1)$ obedece a uma equação de von Neumann própria, $i\hbar d\rho(1)/dt = [H(1), \rho(1)]$. Mostre que, havendo interação H_{12} , $\rho(1)(t)$ em geral não satisfaz uma equação de evolução fechada desse tipo.

Solução.

(a) **Sem interação: evolução unitária do subsistema.** O estado global obedece $i\hbar d\rho/dt = [H, \rho]$. Tomando o traço parcial sobre 2:

$$i\hbar \frac{d\rho(1)}{dt} = \text{Tr}_2 [H, \rho] = \text{Tr}_2 [H(1) \otimes \mathbb{1}, \rho] + \text{Tr}_2 [\mathbb{1} \otimes H(2), \rho].$$

O segundo termo anula-se pela ciclicidade do traço parcial em operadores que agem só em $\mathcal{E}_2$:

$$\text{Tr}_2 [(\mathbb{1} \otimes H(2))\rho - \rho(\mathbb{1} \otimes H(2))] = 0,$$

como se verifica em componentes,

$$\begin{aligned} \sum_n \langle u_m v_n | (\mathbb{1} \otimes H(2))\rho - \rho(\mathbb{1} \otimes H(2)) | u_{m'} v_n \rangle &= \sum_{n, n'} \left[\langle v_n | H(2) | v_{n'} \rangle \langle u_m v_{n'} | \rho | u_{m'} v_n \rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle u_m v_n | \rho | u_{m'} v_{n'} \rangle \langle v_{n'} | H(2) | v_n \rangle \right] = 0, \end{aligned}$$

pois as duas somas duplas são idênticas após a troca $n \leftrightarrow n'$. Já no primeiro termo, $H(1)$ sai do traço parcial:

$$\text{Tr}_2 [(H(1) \otimes \mathbb{1})\rho] = H(1) \text{Tr}_2 \rho = H(1) \rho(1), \quad \text{Tr}_2 [\rho(H(1) \otimes \mathbb{1})] = \rho(1) H(1).$$

Portanto,

$$i\hbar \frac{d\rho(1)}{dt} = [H(1), \rho(1)] :$$

na ausência de interação, o subsistema 1 evolui autonomamente segundo sua própria equação de von Neumann (evolução unitária gerada por $H(1)$). Em particular, pelo Exercício 17, $\text{Tr} \rho(1)^2$ é constante: a pureza do subsistema se conserva.

(b) Com interação: a evolução reduzida não é fechada. Se $H = H(1) \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes H(2) + H_{12}$, o traço parcial dá

$$i\hbar \frac{d\rho(1)}{dt} = [H(1), \rho(1)] + \text{Tr}_2 [H_{12}, \rho],$$

e o último termo depende do operador global $\rho(t)$ completo — em particular das correlações entre 1 e 2 —, não apenas de $\rho(1)(t)$. Logo, em geral não existe hamiltoniano efetivo $\tilde{H}(1)$ tal que $i\hbar d\rho(1)/dt = [\tilde{H}(1), \rho(1)]$.

Um argumento direto mostra que nenhuma equação de von Neumann (evolução unitária) pode descrever $\rho(1)(t)$ nesse caso: evolução unitária preserva $\text{Tr} \rho(1)^2$ (Exercício 17), mas a interação altera a pureza do estado reduzido. Contraexemplo: dois sistemas de dois níveis inicialmente no estado produto puro

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) \otimes |+\rangle, \quad \rho(1)(0) \text{ puro}, \quad \text{Tr} \rho(1)^2(0) = 1,$$

sob a interação $H_{12} = \hbar g |-\rangle\langle -| \otimes (|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|)$ (com $H(1) = H(2) = 0$). O ramo $|-\rangle \otimes |+\rangle$ evolui para $|-\rangle \otimes (\cos gt |+\rangle - i \sin gt |-\rangle)$, enquanto $|+\rangle \otimes |+\rangle$ fica parado, de modo que

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle \otimes |+\rangle + |-\rangle \otimes (\cos gt |+\rangle - i \sin gt |-\rangle)].$$

O estado reduzido resulta

$$\rho(1)(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \cos gt \\ \cos gt & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{base } \{|+\rangle, |-\rangle\}), \quad \text{Tr} \rho(1)^2(t) = \frac{1 + \cos^2 gt}{2}.$$

Em $t = \pi/2g$, $\text{Tr} \rho(1)^2 = \frac{1}{2}$: o estado reduzido tornou-se maximamente misto. Como uma equação de von Neumann fechada conservaria a pureza, concluímos que, na presença de interação, a evolução de $\rho(1)$ não é unitária nem, em geral, descritível por equação fechada em $\rho(1)$ apenas: o subsistema emaranha-se com o outro, e a dinâmica reduzida carrega os efeitos dessas correlações (fenômeno na raiz da decoerência). $\square$

Questão 18 — Precessão de valores esperados

(Weinberg, Problema 3.1)

Um sistema possui observáveis A e B (na representação de Heisenberg) satisfazendo

$$[H, A] = i\omega B, \quad [H, B] = -i\omega A,$$

com ω real. Note que, nesta convenção, ω tem dimensão de energia (pois $[H, A]$ tem dimensão de $H \cdot A$); a frequência angular associada será $\omega/\hbar$. Conhecidos $\langle A \rangle_0$ e $\langle B \rangle_0$ em $t = 0$, queremos $\langle A \rangle(t)$ e $\langle B \rangle(t)$.

Equações de movimento

Para um Hamiltoniano independente do tempo, a equação de Heisenberg para o valor esperado de um observável $\mathcal{O}$ sem dependência explícita no tempo é

$$\frac{d}{dt} \langle \mathcal{O} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, \mathcal{O}] \rangle.$$

Aplicando a A e a B e usando as relações de comutação dadas:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle = \frac{i}{\hbar} (i\omega) \langle B \rangle = -\frac{\omega}{\hbar} \langle B \rangle, \\ \frac{d}{dt} \langle B \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle [H, B] \rangle = \frac{i}{\hbar} (-i\omega) \langle A \rangle = +\frac{\omega}{\hbar} \langle A \rangle. \end{aligned}$$

Solução do sistema acoplado

Derivando a primeira equação e substituindo a segunda:

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle A \rangle = -\frac{\omega}{\hbar} \frac{d}{dt} \langle B \rangle = -\frac{\omega^2}{\hbar^2} \langle A \rangle,$$

isto é, $\langle A \rangle$ oscila harmonicamente com frequência angular $\omega/\hbar$. A solução geral é

$$\langle A \rangle(t) = C_1 \cos\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) + C_2 \sin\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right).$$

Em $t = 0$: $C_1 = \langle A \rangle_0$. Da primeira equação de movimento, $\langle B \rangle = -(\hbar/\omega) d\langle A \rangle/dt$, logo em $t = 0$:

$$\langle B \rangle_0 = -\frac{\hbar}{\omega} \left. \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right|_0 = -\frac{\hbar}{\omega} \cdot \frac{\omega}{\hbar} C_2 = -C_2 \implies C_2 = -\langle B \rangle_0.$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \langle A \rangle(t) &= \langle A \rangle_0 \cos\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) - \langle B \rangle_0 \sin\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right), \\ \langle B \rangle(t) &= -\frac{\hbar}{\omega} \frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) = \langle B \rangle_0 \cos\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right) + \langle A \rangle_0 \sin\left(\frac{\omega t}{\hbar}\right). \end{aligned}$$

Verificação: em $t = 0$ recuperam-se $\langle A \rangle_0$ e $\langle B \rangle_0$; derivando, $d\langle B \rangle/dt = (\omega/\hbar) \langle A \rangle$, como exigido. O par $(\langle A \rangle, \langle B \rangle)$ precessa no plano AB : a quantidade $\langle A \rangle^2 + \langle B \rangle^2$ é constante no tempo, exatamente como as componentes de um vetor girando com velocidade angular $\omega/\hbar$ (é a estrutura típica de um spin precessando num campo magnético). $\square$

Questão 19 — Probabilidade de sobrevivência a tempos curtos

(Weinberg, Problema 3.2)

Seja $|\Psi(0)\rangle$ um estado normalizado com dispersão de energia

$$\Delta E = \sqrt{\langle (H - \langle H \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2},$$

onde $\langle \cdot \rangle \equiv \langle \Psi(0) | \cdot | \Psi(0) \rangle$. Queremos a probabilidade de o sistema ainda ser encontrado em $|\Psi(0)\rangle$ após um tempo curto δt , até segunda ordem em δt .

Amplitude de sobrevivência

Com H independente do tempo, $|\Psi(\delta t)\rangle = e^{-iH\delta t/\hbar} |\Psi(0)\rangle$. A amplitude de sobrevivência é

$$\mathcal{A}(\delta t) = \langle \Psi(0) | \Psi(\delta t) \rangle = \langle \Psi(0) | e^{-iH\delta t/\hbar} | \Psi(0) \rangle.$$

Expandindo a exponencial até segunda ordem em δt :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\delta t) &= \langle \Psi(0) | \mathbb{1} - \frac{i\delta t}{\hbar} H - \frac{\delta t^2}{2\hbar^2} H^2 + \mathcal{O}(\delta t^3) | \Psi(0) \rangle \\ &= 1 - \frac{i\delta t}{\hbar} \langle H \rangle - \frac{\delta t^2}{2\hbar^2} \langle H^2 \rangle + \mathcal{O}(\delta t^3). \end{aligned}$$

Probabilidade

A probabilidade é o módulo quadrado, $P(\delta t) = |\mathcal{A}(\delta t)|^2 = \mathcal{A}^* \mathcal{A}$. Mantendo termos até δt^2 :

$$\begin{aligned} P(\delta t) &= \left(1 + \frac{i\delta t}{\hbar} \langle H \rangle - \frac{\delta t^2}{2\hbar^2} \langle H^2 \rangle \right) \left(1 - \frac{i\delta t}{\hbar} \langle H \rangle - \frac{\delta t^2}{2\hbar^2} \langle H^2 \rangle \right) + \mathcal{O}(\delta t^3) \\ &= 1 - \frac{\delta t^2}{\hbar^2} \langle H^2 \rangle + \frac{\delta t^2}{\hbar^2} \langle H \rangle^2 + \mathcal{O}(\delta t^3) \\ &= 1 - \frac{\delta t^2}{\hbar^2} (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2) + \mathcal{O}(\delta t^3). \end{aligned}$$

Portanto,

$$P(\delta t) = |\langle \Psi(\delta t) | \Psi(0) \rangle|^2 = 1 - \frac{(\Delta E)^2 \delta t^2}{\hbar^2} + \mathcal{O}(\delta t^3).$$

Comentário físico

O decaimento inicial é *quadrático* em δt , e não linear (não exponencial): a taxa instantânea de decaimento se anula em $t = 0$. É a dispersão de energia ΔE — não $\langle H \rangle$ — que controla a "velocidade" com que o estado deixa de se parecer consigo mesmo, em consonância com a relação de incerteza tempo-energia: o tempo característico de evolução é $\tau \sim \hbar/\Delta E$. Esse comportamento quadrático é a base do *efeito Zenão quântico*: medindo-se o sistema N vezes em intervalos $\delta t = t/N$, a probabilidade de sobrevivência total é $[1 - (\Delta E)^2 t^2 / (N^2 \hbar^2)]^N \rightarrow 1$ quando $N \rightarrow \infty$ — medições suficientemente frequentes "congelam" a evolução. $\square$

Questão 20 — Fatorabilidade de todas as correlações implica estado produto

(P.8.3, Ballentine)

Enunciado. Suponha que, para algum estado ρ de um sistema de duas componentes, valha

$$\langle R^{(1)} R^{(2)} \rangle \equiv \text{Tr} \left[\rho \left(R^{(1)} \otimes R^{(2)} \right) \right] = \text{Tr} \left[\rho \left(R^{(1)} \otimes \mathbb{1} \right) \right] \text{Tr} \left[\rho \left(\mathbb{1} \otimes R^{(2)} \right) \right] \equiv \langle R^{(1)} \rangle \langle R^{(2)} \rangle$$

para *todos* os operadores hermitianos $R^{(1)}$ (no fator $\mathcal{H}_1$) e $R^{(2)}$ (no fator $\mathcal{H}_2$). Prove que então $\rho = \tilde{\rho}^{(1)} \otimes \tilde{\rho}^{(2)}$, com $\tilde{\rho}^{(1)} = \text{Tr}_2 \rho$ e $\tilde{\rho}^{(2)} = \text{Tr}_1 \rho$.

Demonstração. Defina o operador

$$\sigma = \rho - \tilde{\rho}^{(1)} \otimes \tilde{\rho}^{(2)}, \quad \tilde{\rho}^{(1)} = \text{Tr}_2 \rho, \quad \tilde{\rho}^{(2)} = \text{Tr}_1 \rho.$$

Queremos mostrar $\sigma = 0$.

Passo 0 (normalizações e consistência). Tomando $R^{(1)} = R^{(2)} = \mathbb{1}$ na hipótese obtemos $\text{Tr} \rho = (\text{Tr} \rho)^2$; como ρ é um operador densidade, $\text{Tr} \rho = 1$, e a hipótese é consistente. Além disso, pela definição de traço parcial,

$$\text{Tr} \left[\rho \left(R^{(1)} \otimes \mathbb{1} \right) \right] = \text{Tr}_1 \left[\tilde{\rho}^{(1)} R^{(1)} \right], \quad \text{Tr} \left[\rho \left(\mathbb{1} \otimes R^{(2)} \right) \right] = \text{Tr}_2 \left[\tilde{\rho}^{(2)} R^{(2)} \right],$$

e $\text{Tr}_1 \tilde{\rho}^{(1)} = \text{Tr}_2 \tilde{\rho}^{(2)} = \text{Tr} \rho = 1$, de modo que $\text{Tr} [\tilde{\rho}^{(1)} \otimes \tilde{\rho}^{(2)}] = 1$ e, em particular, $\text{Tr} \sigma = 0$.

Passo 1 (a hipótese em termos de σ). Para $R^{(1)}, R^{(2)}$ hermitianos quaisquer,

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left[\sigma \left(R^{(1)} \otimes R^{(2)} \right) \right] &= \text{Tr} \left[\rho \left(R^{(1)} \otimes R^{(2)} \right) \right] - \text{Tr} \left[\left(\tilde{\rho}^{(1)} \otimes \tilde{\rho}^{(2)} \right) \left(R^{(1)} \otimes R^{(2)} \right) \right] \\ &= \langle R^{(1)} R^{(2)} \rangle - \text{Tr}_1 \left[\tilde{\rho}^{(1)} R^{(1)} \right] \text{Tr}_2 \left[\tilde{\rho}^{(2)} R^{(2)} \right] \\ &= \langle R^{(1)} R^{(2)} \rangle - \langle R^{(1)} \rangle \langle R^{(2)} \rangle = 0, \end{aligned}$$

onde na segunda linha usamos que o traço de um produto tensorial fatora, $\text{Tr} [A \otimes B] = \text{Tr}_1 A \text{Tr}_2 B$, e a hipótese na última igualdade. Logo

$$\text{Tr} \left[\sigma \left(R^{(1)} \otimes R^{(2)} \right) \right] = 0 \quad \text{para todos } R^{(1)} = R^{(1)\dagger}, R^{(2)} = R^{(2)\dagger}.$$

Passo 2 (de hermitianos para operadores arbitrários). Todo operador X em $\mathcal{H}_1$ se decompõe como combinação complexa de dois hermitianos:

$$X = X_+ + iX_-, \quad X_+ = \frac{X + X^\dagger}{2} = X_+^\dagger, \quad X_- = \frac{X - X^\dagger}{2i} = X_-^\dagger,$$

e analogamente $Y = Y_+ + iY_-$ em $\mathcal{H}_2$. Então, pela linearidade do traço,

$$\text{Tr} [\sigma (X \otimes Y)] = \sum_{a,b \in \{+, -\}} c_{ab} \text{Tr} [\sigma (X_a \otimes Y_b)] = 0, \quad c_{ab} \in \{1, i, -i, -1\},$$

pois cada termo $\text{Tr} [\sigma (X_a \otimes Y_b)]$ envolve hermitianos e se anula pelo Passo 1. Portanto

$$\text{Tr} [\sigma (X \otimes Y)] = 0 \quad \text{para todos os operadores } X \text{ em } \mathcal{H}_1, Y \text{ em } \mathcal{H}_2.$$

Passo 3 (os produtos $X \otimes Y$ geram todo o espaço de operadores). Sejam $\{|i\rangle\}$ e $\{|k\rangle\}$ bases ortonormais de $\mathcal{H}_1$ e $\mathcal{H}_2$, respectivamente. Os operadores $|i\rangle\langle j| \otimes |k\rangle\langle l|$ formam uma base do

espaço de operadores em $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, e todos são da forma $X \otimes Y$. Escolhendo $X = |j\rangle\langle i|$ e $Y = |l\rangle\langle k|$ no Passo 2, calculamos o elemento de matriz geral de σ :

$$\begin{aligned} 0 &= \text{Tr}[\sigma (|j\rangle\langle i| \otimes |l\rangle\langle k|)] = \sum_{i',k'} \langle i'k' | \sigma (|j\rangle\langle i| \otimes |l\rangle\langle k|) | i'k' \rangle \\ &= \sum_{i',k'} \langle i'k' | \sigma | jl \rangle \langle i | i' \rangle \langle k | k' \rangle = \langle ik | \sigma | jl \rangle. \end{aligned}$$

Como isso vale para todos os índices i, j, k, l , *todos* os elementos de matriz de σ na base produto $\{|ik\rangle = |i\rangle \otimes |k\rangle\}$ se anulam, logo $\sigma = 0$.

Concluimos que

$$\rho = \tilde{\rho}^{(1)} \otimes \tilde{\rho}^{(2)} = (\text{Tr}_2 \rho) \otimes (\text{Tr}_1 \rho),$$

isto é, o estado é o produto tensorial dos seus estados reduzidos: a ausência de correlações entre *todos* os pares de observáveis das duas componentes força o operador densidade a ser um estado produto (sem correlações clássicas nem quânticas). $\square$

Questão 21 — Evolução local em uma componente não afeta o estado reduzido da outra

(P.8.6, Ballentine)

Enunciado. Um sistema de duas componentes evolui sob

$$U(t) = U^{(1)}(t) \otimes \mathbb{1},$$

isto é, uma perturbação externa (possivelmente dependente do tempo) age somente sobre a componente 1, e não há interação entre as componentes. Seja $\rho(t) = U(t) \rho(0) U^\dagger(t)$, com $\rho(0)$ um estado *arbitrário* (em geral correlacionado). Prove que o estado parcial da componente 2, $\tilde{\rho}^{(2)}(t) = \text{Tr}_1 \rho(t)$, é independente de t .

Lema (ciclicidade do traço parcial no mesmo fator). Para qualquer operador ρ em $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ e quaisquer operadores $A^{(1)}, B^{(1)}$ em $\mathcal{H}_1$,

$$\text{Tr}_1 \left[\left(A^{(1)} \otimes \mathbb{1} \right) \rho \left(B^{(1)} \otimes \mathbb{1} \right) \right] = \text{Tr}_1 \left[\left(B^{(1)} A^{(1)} \otimes \mathbb{1} \right) \rho \right].$$

Prova do lema. Sejam $\{|i\rangle\}$ base ortonormal de $\mathcal{H}_1$ e $\{|k\rangle\}$ base ortonormal de $\mathcal{H}_2$; escrevemos $|ik\rangle = |i\rangle \otimes |k\rangle$. O elemento de matriz geral do lado esquerdo, como operador em $\mathcal{H}_2$, é

$$\begin{aligned} \langle k | \text{Tr}_1 \left[\left(A^{(1)} \otimes \mathbb{1} \right) \rho \left(B^{(1)} \otimes \mathbb{1} \right) \right] | l \rangle &= \sum_i \langle ik | \left(A^{(1)} \otimes \mathbb{1} \right) \rho \left(B^{(1)} \otimes \mathbb{1} \right) | il \rangle \\ &= \sum_i \sum_{m,n} \langle i | A^{(1)} | m \rangle \langle mk | \rho | nl \rangle \langle n | B^{(1)} | i \rangle \\ &= \sum_{m,n} \left(\sum_i \langle n | B^{(1)} | i \rangle \langle i | A^{(1)} | m \rangle \right) \langle mk | \rho | nl \rangle \\ &= \sum_{m,n} \langle n | B^{(1)} A^{(1)} | m \rangle \langle mk | \rho | nl \rangle \\ &= \sum_n \langle nk | \left(B^{(1)} A^{(1)} \otimes \mathbb{1} \right) \rho | nl \rangle \\ &= \langle k | \text{Tr}_1 \left[\left(B^{(1)} A^{(1)} \otimes \mathbb{1} \right) \rho \right] | l \rangle, \end{aligned}$$

onde na segunda linha inserimos as resoluções da identidade $\mathbb{1} = \sum_m |m\rangle\langle m|$ e $\mathbb{1} = \sum_n |n\rangle\langle n|$ em $\mathcal{H}_1$ (os fatores em $\mathcal{H}_2$ são diagonais porque os operadores externos são $A^{(1)} \otimes \mathbb{1}$ e $B^{(1)} \otimes \mathbb{1}$), e na terceira usamos a completeza $\sum_i |i\rangle\langle i| = \mathbb{1}$. Note que a ciclicidade vale precisamente porque os dois operadores deslocados agem *no mesmo fator* em que o traço parcial é tomado; um operador agindo em $\mathcal{H}_2$ não pode ser ciclado sob Tr_1 . Isso prova o lema. $\square$

Demonstração da questão. Com $U(t) = U^{(1)}(t) \otimes \mathbb{1}$ e usando $(A \otimes \mathbb{1})^\dagger = A^\dagger \otimes \mathbb{1}$,

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}^{(2)}(t) &= \text{Tr}_1 \rho(t) = \text{Tr}_1 \left[\left(U^{(1)}(t) \otimes \mathbb{1} \right) \rho(0) \left(U^{(1)\dagger}(t) \otimes \mathbb{1} \right) \right] \\ &= \text{Tr}_1 \left[\left(U^{(1)\dagger}(t) U^{(1)}(t) \otimes \mathbb{1} \right) \rho(0) \right] \quad (\text{lema, com } A^{(1)} = U^{(1)}, B^{(1)} = U^{(1)\dagger}) \\ &= \text{Tr}_1 [(\mathbb{1} \otimes \mathbb{1}) \rho(0)] \quad (\text{unitariedade: } U^{(1)\dagger} U^{(1)} = \mathbb{1}) \\ &= \text{Tr}_1 \rho(0) = \tilde{\rho}^{(2)}(0). \end{aligned}$$

Equivalentemente, em componentes:

$$\begin{aligned} \langle k | \tilde{\rho}^{(2)}(t) | l \rangle &= \sum_i \langle ik | U(t) \rho(0) U^\dagger(t) | il \rangle \\ &= \sum_{m,n} \left[\sum_i \langle n | U^{(1)\dagger} | i \rangle \langle i | U^{(1)} | m \rangle \right] \langle mk | \rho(0) | nl \rangle = \sum_n \langle nk | \rho(0) | nl \rangle, \end{aligned}$$

que é exatamente $\langle k|\tilde{\rho}^{(2)}(0)|l\rangle$, sem qualquer dependência em t .

Interpretação. O resultado vale para $\rho(0)$ arbitrário, inclusive fortemente correlacionado (emaranhado): enquanto não houver interação entre as componentes, nenhuma operação unitária local sobre a componente 1 — por mais violenta que seja a perturbação externa — altera o estado reduzido $\tilde{\rho}^{(2)}$, e portanto nenhuma estatística de medidas realizadas apenas na componente 2. Em particular, correlações preexistentes não podem ser usadas para transmitir sinais de 1 para 2 (não sinalização). $\square$

Questão 22 — Operador de deslocamento finito

(Desai, Problema 2.9)

Considere o operador de deslocamento (translação) finito

$$F(d) = e^{-ipd/\hbar},$$

com p o operador momento e d real. Como p é hermitiano, $F(d)$ é unitário: $F^\dagger(d)F(d) = e^{+ipd/\hbar}e^{-ipd/\hbar} = \mathbb{1}$.

(a) Comutador $[x, F(d)] = d F(d)$

Primeiro estabelecemos, por indução, que $[x, p^n] = i\hbar n p^{n-1}$. Para $n = 1$ é a relação canônica $[x, p] = i\hbar$. Supondo válida para n , use a regra de Leibniz $[x, p^{n+1}] = [x, p^n]p + p^n[x, p]$:

$$[x, p^{n+1}] = i\hbar n p^{n-1} p + p^n (i\hbar) = i\hbar (n+1) p^n,$$

o que fecha a indução. Agora expanda $F(d)$ em série e comute termo a termo:

$$\begin{aligned} [x, F(d)] &= \left[x, \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-id}{\hbar} \right)^n p^n \right] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-id}{\hbar} \right)^n [x, p^n] \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-id}{\hbar} \right)^n i\hbar n p^{n-1} = i\hbar \left(\frac{-id}{\hbar} \right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \left(\frac{-id}{\hbar} \right)^{n-1} p^{n-1} \\ &= d \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{-id}{\hbar} \right)^m p^m = d F(d), \end{aligned}$$

onde usamos $i\hbar \cdot (-id/\hbar) = d$ e a mudança de índice $m = n - 1$. Portanto

$$\boxed{[x, F(d)] = d F(d)},$$

ou seja, $x F(d) = F(d) (x + d)$: $F(d)$ desloca o operador posição por d .

(b) Valor esperado no estado deslocado

Seja $|\alpha_d\rangle = F(d)|\alpha\rangle$, com $|\alpha\rangle$ normalizado (e portanto $|\alpha_d\rangle$ também, pela unitariedade de F). Do item (a), $xF = Fx + dF$. Então

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_d &= \langle \alpha_d | x | \alpha_d \rangle = \langle \alpha | F^\dagger(d) x F(d) | \alpha \rangle \\ &= \langle \alpha | F^\dagger(d) [F(d) x + d F(d)] | \alpha \rangle \\ &= \langle \alpha | F^\dagger F x | \alpha \rangle + d \langle \alpha | F^\dagger F | \alpha \rangle \\ &= \langle \alpha | x | \alpha \rangle + d \langle \alpha | \alpha \rangle \\ &= \langle x \rangle + d, \end{aligned}$$

usando $F^\dagger F = \mathbb{1}$ e $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$. Assim, o estado transladado tem seu valor esperado de posição deslocado exatamente por d :

$$\boxed{\langle x \rangle_d = \langle x \rangle + d},$$

confirmando que $F(d) = e^{-ipd/\hbar}$ é o gerador finito de translações espaciais, com o momento p como gerador infinitesimal. $\square$

Questão 23 — Regra de soma generalizada com $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$

(Desai, Problema 2.11)

Seja $H = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r})$, com autovetores $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ e $\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbf{1}$. Queremos mostrar, a partir do comutador duplo com os operadores unitários $e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, que

$$\sum_n (E_n - E_s) \left| \langle n | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | s \rangle \right|^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

a) O comutador duplo como operador

Como $V(\mathbf{r})$ e $e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ são funções apenas de $\mathbf{r}$, comutam entre si; apenas a parte cinética contribui:

$$\left[H, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right] = \frac{1}{2m} \left[p^2, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right].$$

Na representação de posição, $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ atuando sobre $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r})$ dá

$$\mathbf{p} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}),$$

isto é, $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ translada o momento: $[p_j, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] = \hbar k_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$. Logo

$$\begin{aligned} \left[H, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right] &= \frac{1}{2m} \left[p^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} p^2 \right] = \frac{1}{2m} \left[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k})^2 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} p^2 \right] \\ &= \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{2m} [2\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{p} + \hbar^2 k^2]. \end{aligned}$$

Comutando agora com $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$: o termo $\hbar^2 k^2$ (múltiplo de $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, função só de $\mathbf{r}$) comuta com $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ e não contribui, e como $e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ comutam entre si,

$$\left[\left[H, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right], e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right] = \frac{\hbar}{m} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} [\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}].$$

Da mesma propriedade de translação, agora com $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$,

$$(\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\psi = -i\hbar\mathbf{k}\cdot\nabla (e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\psi) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (\mathbf{k}\cdot\mathbf{p} - \hbar k^2)\psi,$$

ou seja, $[\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] = -\hbar k^2 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$. Como $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \mathbf{1}$, resulta

$$\boxed{\left[\left[H, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right], e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right] = -\frac{\hbar^2 k^2}{m} \mathbf{1}.}$$

(O sinal global depende apenas da ordem escolhida no comutador duplo; abaixo ele se combina consistentemente com os fatores de energia, produzindo uma soma positiva.)

b) Valor esperado e completeza

Tomemos o elemento diagonal no autoestado $|s\rangle$ e abreviemos $T \equiv e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, de modo que $T^\dagger = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$. Expandindo,

$$\left[[H, T], T^\dagger \right] = H T T^\dagger - T H T^\dagger - T^\dagger H T + T^\dagger T H = H - T H T^\dagger - T^\dagger H T + H,$$

pois $T T^\dagger = T^\dagger T = \mathbf{1}$. Assim,

$$\langle s | \left[[H, T], T^\dagger \right] | s \rangle = 2E_s - \langle s | T H T^\dagger | s \rangle - \langle s | T^\dagger H T | s \rangle.$$

Inserindo a completeza $\mathbb{1} = \sum_n |n\rangle \langle n|$ ao redor de H :

$$\begin{aligned}\langle s|THT^\dagger|s\rangle &= \sum_n E_n \langle s|T|n\rangle \langle n|T^\dagger|s\rangle = \sum_n E_n \left| \langle n|T^\dagger|s\rangle \right|^2 = \sum_n E_n \left| \langle n|e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|s\rangle \right|^2, \\ \langle s|T^\dagger HT|s\rangle &= \sum_n E_n \left| \langle n|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|s\rangle \right|^2,\end{aligned}$$

onde usamos $\langle s|T|n\rangle = \langle n|T^\dagger|s\rangle^*$. Analogamente, escrevendo $E_s = \langle s|THT^\dagger|s\rangle$ com H substituído por $E_s\mathbb{1}$, isto é, $E_s = E_s \sum_n \left| \langle n|T^\dagger|s\rangle \right|^2 = E_s \sum_n \left| \langle n|T|s\rangle \right|^2$ (unitariedade de T), obtemos

$$\langle s|[H, T], T^\dagger|s\rangle = - \sum_n (E_n - E_s) \left| \langle n|e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|s\rangle \right|^2 - \sum_n (E_n - E_s) \left| \langle n|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|s\rangle \right|^2.$$

As duas somas são iguais. De fato, cada uma pode ser calculada diretamente com o comutador *simples* do item (a):

$$\begin{aligned}\sum_n (E_n - E_s) \left| \langle n|T|s\rangle \right|^2 &= \langle s|T^\dagger(H - E_s)T|s\rangle = \langle s|T^\dagger[H, T]|s\rangle \\ &= \langle s|T^\dagger \frac{T}{2m} (2\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \hbar^2 k^2)|s\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \langle \mathbf{p} \rangle_s,\end{aligned}$$

e o valor médio do momento se anula em qualquer estado estacionário normalizável:

$$\langle \mathbf{p} \rangle_s = \frac{im}{\hbar} \langle s|[H, \mathbf{r}]|s\rangle = \frac{im}{\hbar} (E_s - E_s) \langle s|\mathbf{r}|s\rangle = 0.$$

Trocando $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$, a soma com $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ vale igualmente $\hbar^2 k^2/2m$: as duas somas coincidem. Assim, podemos escrever

$$-2 \sum_n (E_n - E_s) \left| \langle n|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|s\rangle \right|^2 = \langle s|[H, T], T^\dagger|s\rangle = -\frac{\hbar^2 k^2}{m}.$$

Portanto,

$$\boxed{\sum_n (E_n - E_s) \left| \langle n|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|s\rangle \right|^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

c) Limite $k \rightarrow 0$: recuperação da regra TRK

Para k pequeno, com $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{x}}$,

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \mathbb{1} + ikx + \mathcal{O}(k^2) \implies \langle n|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|s\rangle = \delta_{ns} + ik \langle n|x|s\rangle + \mathcal{O}(k^2).$$

O termo δ_{ns} não contribui para a soma (tem $E_n - E_s = 0$), e em ordem dominante

$$\sum_n (E_n - E_s) k^2 \left| \langle n|x|s\rangle \right|^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \implies \frac{2m}{\hbar^2} \sum_n (E_n - E_s) \left| \langle n|x|s\rangle \right|^2 = 1,$$

que é exatamente a regra de soma de Thomas–Reiche–Kuhn da Questão 05 (com $s = 0$). A identidade com $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ é, pois, uma generalização da regra TRK a momento transferido finito; ela aparece, por exemplo, no espalhamento inelástico de elétrons e nêutrons, onde fixa o primeiro momento em energia da função de estrutura dinâmica $S(\mathbf{k}, \omega)$ (regra de soma da energia, ou *f-sum rule*), independentemente do potencial $V(\mathbf{r})$. $\square$

Questão 24 — Operador x na representação de Heisenberg

(Desai, Problema 3.3)

a) Partícula livre: $H = p^2/2m$

Na representação de Heisenberg, um operador A (sem dependência explícita do tempo na representação de Schrödinger) evolui segundo

$$A_H(t) = e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar}.$$

Usando o lema de Baker–Campbell–Hausdorff,

$$e^{iHt/\hbar} x e^{-iHt/\hbar} = x + \frac{it}{\hbar} [H, x] + \frac{1}{2!} \left(\frac{it}{\hbar} \right)^2 [H, [H, x]] + \frac{1}{3!} \left(\frac{it}{\hbar} \right)^3 [H, [H, [H, x]]] + \dots$$

Calculemos os comutadores. Com $[x, p] = i\hbar$,

$$[H, x] = \frac{1}{2m} [p^2, x] = \frac{1}{2m} (p[p, x] + [p, x]p) = \frac{1}{2m} (-i\hbar p - i\hbar p) = -\frac{i\hbar}{m} p.$$

Como o resultado é proporcional a p , que comuta com $H = p^2/2m$,

$$[H, [H, x]] = -\frac{i\hbar}{m} [H, p] = 0,$$

e todos os comutadores de ordem superior também se anulam. A série trunca já no termo linear em t :

$$x_H(t) = x + \frac{it}{\hbar} \left(-\frac{i\hbar}{m} p \right) = x + \frac{pt}{m}.$$

Analogamente, $[H, p] = 0$ implica

$$p_H(t) = e^{iHt/\hbar} p e^{-iHt/\hbar} = p.$$

Ou seja, os operadores de Heisenberg reproduzem exatamente a trajetória clássica da partícula livre, $x(t) = x_0 + p_0 t/m$, $p(t) = p_0$, com os operadores iniciais no lugar das condições iniciais. $\square$

b) Potencial $V(x) = \lambda x^n$

Agora $H = \frac{p^2}{2m} + \lambda x^n$. O comutador de primeira ordem para x não muda, pois $[V(x), x] = 0$:

$$[H, x] = -\frac{i\hbar}{m} p.$$

Mas o de segunda ordem deixa de se anular. Usando $[x^n, p] = i\hbar n x^{n-1}$ (que se prova por indução com $[x, p] = i\hbar$),

$$[H, p] = \lambda [x^n, p] = i\hbar \lambda n x^{n-1},$$

logo

$$[H, [H, x]] = -\frac{i\hbar}{m} [H, p] = -\frac{i\hbar}{m} i\hbar \lambda n x^{n-1} = \frac{\hbar^2 \lambda n}{m} x^{n-1} \neq 0.$$

O comutador seguinte envolve $[H, x^{n-1}]$, que gera termos com $p x^{n-2}$ e $x^{n-2} p$; cada comutação com H produz novos monômios em x e p , e a série *não trunca* (exceto nos casos especiais $n = 1$,

força constante, e $n = 2$, oscilador harmônico, em que a álgebra se fecha). Até segunda ordem em t :

$$\begin{aligned} x_H(t) &= x + \frac{it}{\hbar} \left(-\frac{i\hbar}{m} p \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{it}{\hbar} \right)^2 \frac{\hbar^2 \lambda n}{m} x^{n-1} + \mathcal{O}(t^3) \\ &= x + \frac{pt}{m} - \frac{\lambda n x^{n-1}}{2m} t^2 + \mathcal{O}(t^3), \end{aligned}$$

e, para o momento, com $[H, p] = i\hbar \lambda n x^{n-1}$ e

$$[H, [H, p]] = i\hbar \lambda n [H, x^{n-1}] = i\hbar \lambda n \cdot \left(-\frac{i\hbar}{2m} \right) (p x^{n-2} + x^{n-2} p)(n-1),$$

obtemos

$$p_H(t) = p - \lambda n x^{n-1} t - \frac{\lambda n(n-1)}{4m} (p x^{n-2} + x^{n-2} p) t^2 + \mathcal{O}(t^3).$$

Discussão. Esses primeiros termos são exatamente o desenvolvimento de Taylor das soluções das equações de movimento de Heisenberg,

$$\frac{dx_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [x_H, H] = \frac{p_H}{m}, \quad \frac{dp_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [p_H, H] = -\lambda n x_H^{n-1},$$

que são o análogo operatorial das equações clássicas de Hamilton (teorema de Ehrenfest em forma de operadores). Para a partícula livre ($\lambda = 0$) elas se integram trivialmente e recuperam o resultado exato do item anterior; para $n \geq 3$ o sistema de equações operatoriais é não linear e a expansão em comutadores gera uma série infinita, refletindo a impossibilidade de solução fechada geral. $\square$

Questão 25 — Ehrenfest em campo elétrico uniforme

(Desai, Problema 3.7)

Uma partícula de carga e e massa m move-se num campo elétrico uniforme e constante $\mathbf{E}_0$, com Hamiltoniano

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - e \mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}.$$

Queremos mostrar que $m \frac{d^2 \langle \mathbf{r} \rangle}{dt^2} = e \mathbf{E}_0$.

Teorema de Ehrenfest

Para um observável $\mathcal{O}$ sem dependência explícita no tempo,

$$\frac{d}{dt} \langle \mathcal{O} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, \mathcal{O}] \rangle.$$

(i) *Equação para $\langle \mathbf{r} \rangle$.* Como $[x_j, p_k] = i\hbar \delta_{jk}$, temos $[p_k^2, x_j] = p_k[p_k, x_j] + [p_k, x_j]p_k = -2i\hbar \delta_{jk} p_k$, e o termo potencial comuta com x_j . Logo

$$[H, x_j] = \frac{1}{2m} \sum_k [p_k^2, x_j] = -\frac{i\hbar}{m} p_j \implies \frac{d}{dt} \langle x_j \rangle = \frac{i}{\hbar} \left(-\frac{i\hbar}{m} \right) \langle p_j \rangle = \frac{\langle p_j \rangle}{m},$$

ou seja, vetorialmente,

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{r} \rangle = \frac{\langle \mathbf{p} \rangle}{m}.$$

(ii) *Equação para $\langle \mathbf{p} \rangle$.* O termo cinético comuta com p_j ; para o potencial $V(\mathbf{r}) = -e \mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}$,

$$[H, p_j] = \left[-e \sum_k E_{0k} x_k, p_j \right] = -e \sum_k E_{0k} [x_k, p_j] = -e E_{0j} i\hbar,$$

de modo que

$$\frac{d}{dt} \langle p_j \rangle = \frac{i}{\hbar} (-i\hbar e E_{0j}) = e E_{0j} \implies \frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \rangle = e \mathbf{E}_0 = -\langle \nabla V \rangle.$$

Combinação

Derivando (i) em relação ao tempo e substituindo (ii):

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{r} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \rangle = e \mathbf{E}_0, \quad \text{isto é,} \quad \boxed{m \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{r} \rangle = e \mathbf{E}_0.}$$

Integrando,

$$\langle \mathbf{r} \rangle(t) = \langle \mathbf{r} \rangle_0 + \frac{\langle \mathbf{p} \rangle_0}{m} t + \frac{e \mathbf{E}_0}{2m} t^2.$$

Comentário

O valor esperado obedece *exatamente* à equação de Newton clássica $m\ddot{\mathbf{r}} = e\mathbf{E}_0$, sem correções quânticas. Isso ocorre porque o potencial é linear em $\mathbf{r}$: nesse caso $\langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle = \nabla V(\langle \mathbf{r} \rangle)$ identicamente, pois $\nabla V = -e\mathbf{E}_0$ é constante. Em geral, o teorema de Ehrenfest dá $m \frac{d^2 \langle \mathbf{r} \rangle}{dt^2} = -\langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle$, que só coincide com a trajetória clássica de $\langle \mathbf{r} \rangle$ quando $\langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle \approx \nabla V(\langle \mathbf{r} \rangle)$ — exato para potenciais até quadráticos (partícula livre, campo uniforme, oscilador harmônico), e apenas aproximado (pacotes bem localizados) no caso geral. $\square$

Questão 26 — Pacote gaussiano livre

Partícula livre de massa m em uma dimensão, com estado inicial

$$\psi(x, 0) = \psi_0(x) = A \exp\left(\frac{ip_0x}{\hbar} - \frac{x^2}{2a^2}\right),$$

com A , p_0 e a constantes.

a) Evolução de Schrödinger: $\psi(x, t)$ e valores esperados

Normalização. Impondo $\int |\psi_0|^2 dx = 1$:

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/a^2} dx = |A|^2 a\sqrt{\pi} \implies |A|^2 = \frac{1}{a\sqrt{\pi}},$$

e escolhemos $A = (a^2\pi)^{-1/4}$ real e positivo.

Transformada de Fourier do estado inicial. Escrevemos

$$\psi_0(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \tilde{\psi}_0(k) e^{ikx}, \quad \tilde{\psi}_0(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \psi_0(x) e^{-ikx}.$$

Com $k_0 \equiv p_0/\hbar$,

$$\tilde{\psi}_0(k) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{x^2}{2a^2} - i(k - k_0)x\right] dx.$$

Usando a integral gaussiana

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha u^2 + \beta u} du = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\beta^2/4\alpha}, \quad \text{Re } \alpha > 0,$$

com $\alpha = 1/2a^2$ e $\beta = -i(k - k_0)$:

$$\tilde{\psi}_0(k) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{2\pi a^2} \exp\left[-\frac{a^2(k - k_0)^2}{2}\right] = A a \exp\left[-\frac{a^2(k - k_0)^2}{2}\right].$$

Como esperado, o pacote em momento é uma gaussiana centrada em $k_0 = p_0/\hbar$.

Propagação. Para a partícula livre, $H = p^2/2m$, e cada onda plana e^{ikx} é autoestado com energia $E_k = \hbar^2 k^2/2m$; logo

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \tilde{\psi}_0(k) e^{ikx} e^{-i\hbar k^2 t/2m} \\ &= \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp\left[-\frac{a^2(k - k_0)^2}{2} + ikx - \frac{i\hbar t}{2m} k^2\right]. \end{aligned}$$

Mudando a variável para $u = k - k_0$ e definindo

$$\alpha \equiv \frac{a^2}{2} + \frac{i\hbar t}{2m} = \frac{a^2}{2} \left(1 + \frac{i\hbar t}{ma^2} \right), \quad \beta \equiv i \left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m} \right) = i \left(x - \frac{p_0 t}{m} \right),$$

o expoente fica

$$-\frac{a^2 u^2}{2} + i(u + k_0)x - \frac{i\hbar t}{2m}(u + k_0)^2 = -\alpha u^2 + \beta u + ik_0 x - \frac{i\hbar k_0^2 t}{2m},$$

e a mesma integral gaussiana dá

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp \left[ik_0 x - \frac{i\hbar k_0^2 t}{2m} + \frac{\beta^2}{4\alpha} \right] \\ &= \frac{A}{\sqrt{1 + i\hbar t/ma^2}} \exp \left[\frac{ip_0 x}{\hbar} - \frac{ip_0^2 t}{2m\hbar} - \frac{(x - p_0 t/m)^2}{2a^2 (1 + i\hbar t/ma^2)} \right], \end{aligned}$$

com $A = (a^2 \pi)^{-1/4}$. Em $t = 0$ recupera-se $\psi_0(x)$, como deve ser.

Densidade de probabilidade. Racionalizando o último expoente,

$$\frac{1}{1 + i\hbar t/ma^2} = \frac{1 - i\hbar t/ma^2}{1 + \hbar^2 t^2/m^2 a^4},$$

a parte real do expoente gaussiano é $-\frac{(x - p_0 t/m)^2}{2a^2 (1 + \hbar^2 t^2/m^2 a^4)}$, de modo que

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{a(t)\sqrt{\pi}} \exp \left[-\frac{(x - p_0 t/m)^2}{a^2(t)} \right], \quad a(t) \equiv a \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}.$$

É uma gaussiana normalizada, *centrada em* $x_c(t) = p_0 t/m$ (o centro se move com a velocidade de grupo p_0/m) e com *largura crescente* $a(t)$: o pacote se alarga indefinidamente, com $a(t) \rightarrow \hbar t/(ma)$ para $t \gg ma^2/\hbar$.

Valores esperados de posição. Como $|\psi|^2$ é gaussiana centrada em $p_0 t/m$,

$$\begin{aligned} \langle x \rangle(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x, t)|^2 dx = \frac{p_0 t}{m}, \\ \langle x^2 \rangle(t) &= \left(\frac{p_0 t}{m} \right)^2 + \frac{a^2(t)}{2}, \\ (\Delta x)^2(t) &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{a^2(t)}{2} = \frac{a^2}{2} \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4} \right). \end{aligned}$$

Valores esperados de momento. No espaço de momentos, a partícula livre não muda a distribuição: $|\tilde{\psi}(k, t)|^2 = |\tilde{\psi}_0(k)|^2$, pois a evolução só acrescenta a fase $e^{-i\hbar k^2 t/2m}$. Com

$$|\tilde{\psi}_0(k)|^2 = |A|^2 a^2 e^{-a^2(k-k_0)^2} = \frac{a}{\sqrt{\pi}} e^{-a^2(k-k_0)^2},$$

que é gaussiana em k centrada em k_0 com variância $1/2a^2$, obtemos

$$\begin{aligned}\langle p \rangle(t) &= \hbar \int k |\tilde{\psi}_0(k)|^2 dk = \hbar k_0 = p_0 \quad (\text{constante, como exige a conservação de } p), \\ (\Delta p)^2(t) &= \hbar^2 \left[\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2 \right] = \hbar^2 \cdot \frac{1}{2a^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2} \quad (\text{constante}).\end{aligned}$$

Note que

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}} \geq \frac{\hbar}{2},$$

com igualdade (pacote de incerteza mínima) apenas em $t = 0$. □

b) Operadores na representação de Heisenberg

Na representação de Heisenberg, $\mathcal{O}_H(t) = e^{iHt/\hbar} \mathcal{O} e^{-iHt/\hbar}$, com $H = p^2/2m$.

(i) Transformação unitária e expansão em comutadores. Pelo lema de Baker–Campbell–Hausdorff,

$$x_H(t) = e^{iHt/\hbar} x e^{-iHt/\hbar} = x + \frac{it}{\hbar} [H, x] + \frac{1}{2!} \left(\frac{it}{\hbar} \right)^2 [H, [H, x]] + \dots$$

O primeiro comutador, usando $[x, p] = i\hbar$:

$$[H, x] = \frac{1}{2m} [p^2, x] = \frac{1}{2m} (p[p, x] + [p, x]p) = \frac{1}{2m} (-i\hbar p - i\hbar p) = -\frac{i\hbar}{m} p.$$

O segundo comutador anula-se, pois $[H, p] = \frac{1}{2m} [p^2, p] = 0$:

$$[H, [H, x]] = -\frac{i\hbar}{m} [H, p] = 0,$$

e o mesmo vale para todos os comutadores de ordem superior — a série *trunca*:

$$\begin{aligned}x_H(t) &= x + \frac{it}{\hbar} \left(-\frac{i\hbar}{m} p \right) = x + \frac{p t}{m}, \\ p_H(t) &= e^{iHt/\hbar} p e^{-iHt/\hbar} = p, \quad \text{pois } [H, p] = 0.\end{aligned}$$

(ii) Equações de Heisenberg. As equações de movimento são

$$\begin{aligned}\frac{dp_H}{dt} &= \frac{i}{\hbar}[H, p_H] = 0 \implies p_H(t) = p_H(0) = p, \\ \frac{dx_H}{dt} &= \frac{i}{\hbar}[H, x_H] = \frac{i}{\hbar} \left(-\frac{i\hbar}{m} p_H \right) = \frac{p_H}{m} = \frac{p}{m},\end{aligned}$$

onde usamos que os comutadores a tempos iguais na representação de Heisenberg têm a mesma forma canônica, $[x_H(t), p_H(t)] = i\hbar$. Integrando,

$$x_H(t) = x + \frac{pt}{m}, \quad p_H(t) = p,$$

em pleno acordo com o item (i). São as equações clássicas da partícula livre promovidas a operadores. $\square$

c) Valores esperados via x_H , p_H e verificação

Na representação de Heisenberg os valores esperados são tomados no estado *fixo* $|\psi_0\rangle$:

$$\begin{aligned}\langle x \rangle(t) &= \langle \psi_0 | x_H(t) | \psi_0 \rangle = \langle x \rangle_0 + \frac{t}{m} \langle p \rangle_0, \\ \langle p \rangle(t) &= \langle \psi_0 | p_H(t) | \psi_0 \rangle = \langle p \rangle_0.\end{aligned}$$

Para a variância de x :

$$\langle x_H^2(t) \rangle = \left\langle \left(x + \frac{pt}{m} \right)^2 \right\rangle_0 = \langle x^2 \rangle_0 + \frac{t}{m} \langle xp + px \rangle_0 + \frac{t^2}{m^2} \langle p^2 \rangle_0,$$

onde o termo cruzado é simetrizado porque x e p não comutam. Subtraindo $\langle x_H \rangle^2 = \langle x \rangle_0^2 + \frac{2t}{m} \langle x \rangle_0 \langle p \rangle_0 + \frac{t^2}{m^2} \langle p \rangle_0^2$:

$$\begin{aligned}(\Delta x)^2(t) &= (\Delta x)_0^2 + \frac{2t}{m} \left[\frac{1}{2} \langle xp + px \rangle_0 - \langle x \rangle_0 \langle p \rangle_0 \right] + \frac{t^2}{m^2} (\Delta p)_0^2, \\ (\Delta p)^2(t) &= (\Delta p)_0^2.\end{aligned}$$

Momentos iniciais no estado gaussiano. Com $\psi_0(x) = A e^{ip_0 x/\hbar - x^2/2a^2}$ e $|\psi_0(x)|^2 = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} e^{-x^2/a^2}$:

$$\begin{aligned}\langle x \rangle_0 &= \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-x^2/a^2} dx = 0 \quad (\text{integrando ímpar}), \\ \langle x^2 \rangle_0 &= \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2/a^2} dx = \frac{a^2}{2} \implies (\Delta x)_0^2 = \frac{a^2}{2}.\end{aligned}$$

Para o momento, $p\psi_0 = -i\hbar\partial_x\psi_0 = \left(p_0 + \frac{i\hbar x}{a^2}\right)\psi_0$, logo

$$\begin{aligned}\langle p \rangle_0 &= \int \psi_0^* \left(p_0 + \frac{i\hbar x}{a^2} \right) \psi_0 dx = p_0 + \frac{i\hbar}{a^2} \underbrace{\langle x \rangle_0}_{=0} = p_0, \\ \langle p^2 \rangle_0 &= \int |p\psi_0|^2 dx = \int \left| p_0 + \frac{i\hbar x}{a^2} \right|^2 |\psi_0|^2 dx = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{a^4} \langle x^2 \rangle_0 = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{2a^2}, \\ (\Delta p)_0^2 &= \frac{\hbar^2}{2a^2}.\end{aligned}$$

O termo de correlação $\langle xp + px \rangle_0$. Como $xp + px$ é hermitiano,

$$\langle xp + px \rangle_0 = \langle xp \rangle_0 + \langle xp \rangle_0^* = 2 \operatorname{Re} \langle xp \rangle_0.$$

Calculamos $\langle xp \rangle_0$ explicitamente:

$$\begin{aligned}\langle xp \rangle_0 &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) x \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \left(p_0 + \frac{i\hbar x}{a^2} \right) |\psi_0(x)|^2 dx \\ &= p_0 \underbrace{\langle x \rangle_0}_{=0} + \frac{i\hbar}{a^2} \langle x^2 \rangle_0 = \frac{i\hbar}{a^2} \cdot \frac{a^2}{2} = \frac{i\hbar}{2}.\end{aligned}$$

O resultado é *puramente imaginário* (aliás, consistente com $\langle xp \rangle - \langle px \rangle = \langle [x, p] \rangle = i\hbar$), de modo que

$$\langle xp + px \rangle_0 = 2 \operatorname{Re} \left(\frac{i\hbar}{2} \right) = 0.$$

Fisicamente: o estado inicial é uma gaussiana *sem chirp* (a fase $p_0x/\hbar$ é linear em x , sem termo quadrático), logo posição e momento não estão correlacionados em $t = 0$.

Verificação. Inserindo os momentos iniciais nas fórmulas de Heisenberg:

$$\begin{aligned}\langle x \rangle(t) &= 0 + \frac{p_0 t}{m} = \frac{p_0 t}{m}, & \langle p \rangle(t) &= p_0, \\ (\Delta x)^2(t) &= \frac{a^2}{2} + \frac{2t}{m} \left[\frac{1}{2} \cdot 0 - 0 \cdot p_0 \right] + \frac{t^2}{m^2} \cdot \frac{\hbar^2}{2a^2} = \frac{a^2}{2} \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4} \right), \\ (\Delta p)^2(t) &= \frac{\hbar^2}{2a^2},\end{aligned}$$

reproduzindo *exatamente* os resultados do item (a), sem precisar propagar a função de onda: toda a dinâmica está nos operadores $x_H(t)$ e $p_H(t)$, e o alargamento do pacote vem do termo $\frac{t^2}{m^2}(\Delta p)_0^2$ — a dispersão inicial de velocidades $\Delta p/m$ espalha o pacote linearmente em t . $\square$