$\boxed{\text{AULA 4}}$ Para completar nossa discussão de $\boxed{\text{Estados Emaranhados}}$. Vejamos um sistema composto de 2 subsistemas com coordenadas q_1 e q_2. (1D → 3D)

Seja $|\psi\rangle$ um ~~subsistema~~ sistema puro arbitrário, onde

$$\langle q_1 q_2|\psi\rangle = \psi(q_1, q_2) \quad (1a) \quad \text{e} \quad \rho = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (1b)$$

Podemos calcular o elemento de matriz

$$\langle q_1 q_2|\rho|q_1' q_2'\rangle = \langle q_1 q_2|\psi\rangle\langle\psi|q_1' q_2'\rangle = \psi(q_1,q_2)\,\psi^*(q_1',q_2') \quad (2)$$

Agora consideremos o observável $A_1 = A_1 \otimes \mathbb{1}_2$ do subsistema 1

$$|q_1 q_2\rangle = |q_1\rangle \otimes |q_2\rangle \quad (3a) \qquad \langle q_1 q_2|q_1' q_2'\rangle = \langle q_1|q_1'\rangle\langle q_2|q_2'\rangle = \delta(q_1-q_1')\,\delta(q_2-q_2') \quad (3b)$$

logo

$$\langle q_1 q_2|A_1|q_1' q_2'\rangle = \langle q_1|A_1|q_1'\rangle\,\delta(q_2-q_2') \quad (4)$$

o valor esperado de A_1 em $|\psi\rangle$ é

$$\langle A_1\rangle_\psi = \int dq_1 \int dq_1' \int dq_2 \int dq_2' \langle\psi|q_1 q_2\rangle\langle q_1 q_2|A_1|q_1' q_2'\rangle\langle q_1' q_2'|\psi\rangle$$

$$= \int dq_1\, dq_1'\, dq_2\, dq_2'\, \psi^*(q_1,q_2)\langle q_1|A_1|q_1'\rangle\,\delta(q_2-q_2')\,\psi(q_1',q_2')$$

$$= \int dq_1\, dq_1' \langle q_1|A_1|q_1'\rangle \boxed{\underbrace{\int dq_2\, \psi^*(q_1,q_2)\,\psi(q_1',q_2)}_{\langle q_1' q_2|\rho|q_1 q_2\rangle}} \quad (5)$$

(1

definimos a matrix densidade reduzida ρ_1 como aquela cujos elementos

$$\langle q_1' | \rho_1 | q_1 \rangle = \int dq_2 \, \langle q_1' \, q_2 | \rho | q_1 q_2 \rangle \quad (6)$$

Assim

$$\langle A_1 \rangle_\psi = \int dq_1 \, dq_1' \, \langle q_1 | A_1 | q_1' \rangle \langle q_1' | \rho_1 | q_1 \rangle$$

$$= \int dq_1 \langle q_1 | A_1 \rho_1 | q_1 \rangle = \mathrm{Tr}\,(A_1 \rho_1) \quad (7)$$

de forma análoga ao que vimos p/ dimensão finita.

II – QUANTIZAÇÃO CANÔNICA

Considere um sistema de N "partículas" em 3D i.e. um sistema de 3N graus de liberdade sem estrutura interna (do ponto de vista da escala que estamos considerando). P/ cada grau de liberdade introduzimos os operadores hermitianos

coordenada – q_i $\quad i = 1, 2, \ldots, 3N$

momento – p_i

Notação: os auto valores desses operadores serão designados pelos "primos"; i.e. q_i', p_i' etc.

POSTULAMOS que esses operadores q_i e p_i obedecem as chamadas regras de comutação canônicas

$$\begin{cases} [q_i, p_i] = i\hbar\,\delta_{ij} & (1a) \\ [q_i, q_j] = [p_i, p_j] = 0 & (1b) \end{cases}$$

REGRAS DE COMUTAÇÃO CANÔNICAS

como os q's comutam entre si podemos diagonalizá-los simultaneamente (o mesmo vale p/ os p's!)

Temos assim 2 conjunto de auto-kets simultâneos:

$$|q_1' q_2' \ldots q_{3N}'\rangle \equiv |q_1'\rangle \otimes |q_2'\rangle \otimes \ldots \otimes |q_{3N}'\rangle \quad (2a)$$

$$|p_1' p_2' \ldots p_{3N}'\rangle \equiv |p_1'\rangle \otimes |p_2'\rangle \otimes \ldots \otimes |p_{3N}'\rangle \quad (2b)$$

Por causa desse fatorização é suficiente examinar o que ocorre com 1 grau de liberdade. (q e p), i.e

$[q, p] = i\hbar$

De fato:

$$[q, p^n] = i n \hbar\, p^{n-1} \quad (3a)$$

(Mostre!)

$$[p, q^n] = -i n \hbar\, q^{n-1} \quad (3b)$$

$\Rightarrow$ se $G(p)$ e $F(q)$ são funções de p e q que permitem uma expansão em série (como e^p ou e^q)

$$[q, G(p)] = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} G(p) \quad (4a)$$

(Mostre!)

$$[p, F(q)] = -i\hbar \frac{\partial F(q)}{\partial q} \quad (4b)$$

Considere o operador unitário

$$T(a) = e^{-iap/\hbar} \qquad a \in \mathbb{R} \qquad (5)$$

$$qT(a) = T(a)q + i\hbar \left(\frac{-ia}{\hbar}\right) T(a) = T(a)q + a\,T(a)$$

$$= T(a)(q+a) \qquad (6)$$

Seja $|q'\rangle$ um auto ket de q:

$$q|q'\rangle = q'|q'\rangle \qquad (7)$$

então

$$qT(a)|q'\rangle = T(a)\,q|q'\rangle + a\,T(a)|q'\rangle$$

$$= T(a)\,q'|q'\rangle + a\,T(a)|q'\rangle$$

$$= (q'+a)\,T(a)|q'\rangle \qquad (8)$$

$\therefore\ T(a)|q'\rangle \equiv |q'+a\rangle$ é um auto ket de q com auto valor $q'+a$

mas como a é arbitrário $\Longrightarrow$ todos os números reais são auto-valores de q! Conseqüentemente q (e p) tem espectro contínuo ($-\infty \le q' \le \infty$!)

O operador unitário $T(a)$ produz uma <u>translação espacial</u> <u>de distância a</u>

$$T^{\dagger}(a)\,q\,T(a) = q + a \qquad (9)$$

que é a transf. unitária do operador de coord. que corresponde à translação espacial

Como T é unitário ele preserva a norma.

$$T(a)\,|q'\rangle = |q'+a\rangle$$

$\boxed{\text{Considerações de simetria}}$ em grande parte determinam as regras de comutação canônicas:

— translações ao longo de direções distintas comutam

$$\Rightarrow [p_i, p_j] = 0$$

— todas as componentes das coordenadas podem ser simultaneamente especificadas

$$\Rightarrow [q_i, q_j] = 0$$

— a imposição que as coordenadas se transformem como

$$T^+(a)\, q\, T(a) = q + a \qquad \Rightarrow [q, p] = iC$$

$$\Rightarrow \quad [q_i, p_j] = i C \delta_{ij} \qquad (C \text{ tem dimensão de ação})$$

O mesmo vale para o momento p

$$K(k) = e^{iqk/\hbar} \quad (10) \quad k \in \mathbb{R})$$

$$\boxed{K^+(k)\, p\, K(k) = p + k} \quad (11a)$$

$$K(k)\,|p'\rangle = |p'+k\rangle \quad (11b)$$

translações no espaço dos momentos são chamadas de boosts.

Por causa do espectro contínuo dos autokets das coord. e mom. esses são normalizados por "funções"-δ

$$\langle q' | q'' \rangle = \delta(q' - q'') \qquad (12a)$$

$$\langle p', p'' \rangle = \delta(p' - p'') \qquad (12b)$$

Funções de Onda de Schrödinger

A função de onda de Schrödinger é o produto escalar $\langle q_1' \dots q_{3N}' | \psi \rangle$.

A formulação de Schrödinger da M.Q. segue de quantização canônica escrevendo operadores e kets na representação das coordenadas

Sejam $|0_q\rangle$ e $|0_p\rangle$ os autokets de q e p, respectivamente, com autovalor nulo. Usando os operadores unitários T e K

$$\langle q' | p' \rangle = \langle 0_q | T^{+}(q') | p' \rangle = \langle 0_q | e^{\frac{i q' p}{\hbar}} | p' \rangle$$

$$= e^{\frac{i q' p'}{\hbar}} \langle 0_q | p' \rangle = e^{\frac{i q' p'}{\hbar}} \langle 0_q | K(p') | 0_p \rangle$$

$$= e^{\frac{i q' p'}{\hbar}} \langle 0_q | e^{\frac{i p' q}{\hbar}} | 0_p \rangle = e^{\frac{i q' p'}{\hbar}} \langle 0_q | 0_p \rangle$$

constante a ser determinada.
(há escolha arbitrária aqui)

usando

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

onde $\delta(p') = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dq' \, e^{\frac{iq'p'}{\hbar}}$ [representação de Fourier da δ-Dirac]

$$\boxed{\langle q'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip'q'}{\hbar}} = \varphi_{p'}(q')} \quad (1)$$

para sistema de N-partículas a função de onda quando todas as partículas são auto-estados de momento é o produto de ondas planas

$$\langle q_1' \cdots | p_1' \cdots \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3N}{2}}} \prod_{i=1}^{3N} e^{ip_i' q_i'/\hbar} \qquad (2)$$

Funções de onda do espaço dos momentos e do espaço de configurações são definidas como produtos escalares de $|\psi\rangle$ com os auto kets dos mom e coord.

$$\psi(q') = \langle q'|\psi\rangle$$

$$\phi(p') = \langle p'|\psi\rangle$$

logo $\phi(p') = \int dq' \langle p'|q'\rangle\langle q'|\psi\rangle$

$$= \int \frac{dq'}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{ip'q'}{\hbar}} \psi(q')$$

e

$$\psi(q') = \int dp' \, \langle q'|p'\rangle\langle p'|\psi\rangle$$
$$= \int dp' \, e^{\frac{i p'q'}{\hbar}} \, \phi(p')$$

$|\psi(q')|^2$ e $|\phi(p')|^2$ são as distribuições de probabilidade nos espaços de configurações e momentos, respectivamente

Dado um não é possível construir o outro (só depende do módulo, as fases são perdidas!)

Note: A matriz densidade em qualquer representação é suficiente para determinar a matriz densidade em qualquer outra representação

$$\langle q'|\rho|q''\rangle = \psi(q')\,\psi^*(q'')$$
$$\langle p'|\rho|p''\rangle = \phi(p')\,\phi^*(p'')$$

e logo

$$\langle p'|\rho|p''\rangle = \int \frac{dq'\,dq''}{2\pi\hbar} \, e^{\frac{-i(p'q' - p''q'')}{\hbar}} \, \langle q'|\rho|q''\rangle$$

para calcular a ~~distribuição~~ matriz densidade na representação dos momentos é preciso conhecer os elementos de ρ fora da diagonal na representação das coordenadas

Isso ilustra uma propriedade geral das distribuições de probabilidade na M.Q: a distribuição de probabilidades para um CCOC não determina a distribuição de probabilidades para um observável incompatível!

Para determinar a ação do operador de momento sobre as funções de onda do espaço de configurações os elementos de matriz de p na representação q são necessários:

$$\langle q'|p^n|q''\rangle = \int dp' \langle q'|p'\rangle \langle p'|p^n|q''\rangle$$

$$= \int dp' \langle q'|p'\rangle (p')^n \langle p'|q''\rangle$$

$$= \int dp' \frac{e^{\frac{ip'q'}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} (p')^n \frac{e^{-\frac{ip'q''}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \int \frac{dp'}{2\pi\hbar} (p')^n e^{\frac{ip'}{\hbar}(q'-q'')}$$

$$= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^n \delta^{(n)}(q'-q'')$$

$$\delta(x) = \int \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \qquad \delta^{(n)}(x) = \frac{d^n}{dx^n}\delta(x) = \int \frac{dk}{2\pi} (ik)^n e^{ikx}$$

$$k = \frac{p}{\hbar}$$

$$\frac{d^n f(x)}{dx^n} = \int dx' \, \delta^{(n)}(x-x') f(x')$$ para funções suficientemente ~~cont~~ contínuas em x.

$$\therefore \langle q'|p^n|\psi\rangle = \int dp' \langle q'|p'\rangle\langle p'|p^n|\psi\rangle$$

$$= \int dp' \langle q'|p'\rangle (p')^n \langle p'|\psi\rangle$$

$$= \int dp' \frac{e^{ip'q'}}{\sqrt{2\pi\hbar}} (p')^n \phi(p')$$

$$= \int dp' \frac{e^{ip'q'}}{\sqrt{2\pi\hbar}} (p')^n \int \frac{dq''}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{ip'q''}{\hbar}} \psi(q'')$$

$$= \int dq'' \int \frac{dp'}{2\pi\hbar} (p')^n e^{\frac{ip'}{\hbar}(q'-q'')} \psi(q'')$$

$$= \int dq'' \left(\frac{\hbar}{i}\right)^n \delta^{(n)}(q'-q'') \psi(q'')$$

$$= \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}\right)^n \psi(q')$$

$$\boxed{\langle q'|p^n|\psi\rangle = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial q'}\right)^n \psi(q')}$$

de forma análoga

$$\boxed{\langle p'|q^n|\psi\rangle = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\right)^n \phi(p')}$$

a generalização para 3N graus de liberdade é direta.