Aulas 2 e 3

Operador Densidade

Fundamentos da Interação da Radiação com a Matéria
SFI5905 / IFSC-USP

30/03/2021
Sérgio R. Muniz

Operador Densidade

Motivação
Formulamos a MQ em termos de vetores de estado, que descrevem estados puros. Porém, para estudar processos incoerentes ou dissipativos, é necessário usar uma descrição estatística dos estados quânticos, ao invés de estados puros.
Há uma formulação alternativa, usando o chamado **operador densidade**, que é matematicamente equivalente e mais geral, pois é muito mais conveniente para descrever situações comumente encontradas, como, por exemplo, *ensemble* de misturas estatísticas de estados.

Operador Densidade

Definição
Seja um conjunto de vetores de estado $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \ldots, |\psi_n\rangle\}$ de um dado sistema quântico. O **operador densidade** é definido por:

$$\hat{\rho} \equiv \sum_{i=1}^{n} p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

$$\hat{\rho} = p_1|\psi_1\rangle + p_2|\psi_2\rangle + \cdots + p_n|\psi_n\rangle$$

onde os coeficientes p_i representam as probabiliddes, $p_i \in [0, 1]$, de cada um dos estados $|\psi_i\rangle$, tal que:

$$\sum p_i = 1$$

Propriedades do operador Densidade

1. O operador densidade é Hermitiano $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$
2. Os autovalores do operador densidade satisfazem $0 \leq \lambda_i \leq 1$
3. O traço do operador densidade é sempre unitário, $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}) = 1$
4. O traço do quadrado do operador mede a pureza do estado, sendo

$$\frac{1}{n} \leq \mathrm{Tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1$$

5. Para estados puros, $\mathbf{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$
6. Para estados de mistura estatística, $\mathbf{Tr}(\hat{\rho}^2) < 1$
7. Num espaço de dimensão n, o estado de máxima mistura tem

$$\hat{\rho} = \frac{1}{n}\mathbb{1} \text{ , e } \mathbf{Tr}(\hat{\rho}^2) = \frac{1}{n}$$

8. O valor esperado (valor médio) de um operador $\hat{A}$ é dado por

$$\langle \hat{A} \rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) = \mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{\rho})$$

9. O operador densidade é positivo, $\langle \hat{\rho} \rangle \geq 0$
10. A evolução temporal é descritas por transformações unitárias $\hat{\rho}(t) = U(t, t_o)\hat{\rho}(t_o)U^\dagger(t, t_o)$, onde $U(t, t_o)$ é solução de $i\hbar\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$