2021-1, "STATPHYS", AULA 17

OBJETIVOS: DESCREVER ELEMENTOS BÁSICOS DA MECÂNICA ESTATÍSTICA QUÂNTICA.

OPERADOR DENSIDADE

EM ÚLTIMA INSTÂNCIA, A NATUREZA QUÂNTICA DA MATÉRIA É O QUE DETERMINA O QUE SÃO "MICROESTADOS DE UM SISTEMA". ALÉM DISSO, HÁ INCERTEZAS DECORRENTES DO PROCESSO DE MEDIDA MESMO QUANDO SE CONSIDERA UM ESTADO QUÂNTICO BEM DEFINIDO.

* SISTEMAS QUÂNTICOS ISOLADOS

POR SIMPLICIDADE, VAMOS PENSAR EM UMA PARTÍCULA QUÂNTICA, DESCRITA (A MENOS DE UMA FASE GLOBAL) POR

UM VETOR DE ESTADO EM UM CERTO ESPAÇO DE HILBERT $\mathcal{H}$, ONDE TAMBÉM ESTÁ DEFINIDO UM OPERADOR (HERMITIANO) HAMILTONIANO, H. O VETOR DE ESTADO EVOLUI TEMPORALMENTE SEGUNDO A EQ. DE SCHRÖDINGER

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = H|\psi\rangle} .$$

NOTE QUE $|\psi\rangle = |\psi(t)\rangle$ E QUE O ESTADO DINÂMICO TAMBÉM PODE SER DESCRITO POR UM OPERADOR (UNITÁRIO, $U^{-1} = U^{+}$) DE EVOLUÇÃO TEMPORAL,

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = U(t_0, t)|\psi(t_0)\rangle} ,$$

COM $\boxed{U(t_0, t) = e^{-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}}}$.

A CADA OBSERVÁVEL FÍSICO CORRESPONDE UM OPERADOR HERMITIANO A

EM $\mathcal{H}$, QUE ADMITE UM CONJUNTO COMPLETO (BASE) DE AUTO-ESTADOS $\{|a_n\rangle\}$,
E ORTONORMAL

$$\boxed{A|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle}.$$ $a_n \in \mathbb{R}$

NESSA BASE GENÉRICA, AS AMPLITUDES DE PROBABILIDADE SÃO DINÂMICAS,

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|a_n\rangle}$$ $c_n(t) \in \mathbb{C}$

E A PROBABILIDADE DE UMA MEDIDA COLAPSAR $|\psi(t)\rangle$ EM $|a_n\rangle$ E "REALIZAR" O AUTOVALOR a_n DE A É

$$\boxed{\mathbb{P}(A \xrightarrow{t} a_n) = |c_n(t)|^2}.$$ MAX BORN

O VALOR MÉDIO DE A NO ESTADO $|\psi\rangle$ (EM ALGUM INSTANTE t SUPRIMIDO) É

$$\langle A\rangle_\psi = \sum_n a_n \mathbb{P}(a_n) = \sum_n a_n |c_n|^2 =$$

$$= \sum_n a_n c_n c_n^* = \sum_n a_n \langle a_n|\psi\rangle\langle a_n|\psi\rangle^* =$$

$$= \sum_n a_n \langle \psi | a_n \rangle \langle a_n | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | \left\{ \sum_n a_n | a_n \rangle \langle a_n | \right\} | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | \left\{ \sum_n A | a_n \rangle \langle a_n | \right\} | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | A \underbrace{\left\{ \sum_n | a_n \rangle \langle a_n | \right\}}_{= \mathbb{I}} | \psi \rangle$$

$$\therefore \boxed{\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | A | \psi \rangle}$$

*** AINDA ISOLADO, ESTADO PURO**

A INFORMAÇÃO DESCRITA EM UM ÚNICO VETOR DE ESTADO ESTÁ CONTIDA TAMBÉM NO OPERADOR

$$\boxed{\rho \equiv | \psi \rangle \langle \psi |}.$$

ESTADO PURO

→ DINÂMICA: $i\hbar \dfrac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = H |\psi\rangle$

$$\Updownarrow$$

$$-i\hbar \, \partial \langle \psi | / \partial t = \langle \psi | H$$

$$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t} = i\hbar\left\{\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t}\langle\psi| + |\psi\rangle\frac{\partial\langle\psi|}{\partial t}\right\}$$

$$= H|\psi\rangle\langle\psi| - |\psi\rangle\langle\psi|H = [H,\rho]$$

$$\therefore \boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[H,\rho]}$$

EQ. DE VON NEUMANN OU DE LIOUVILLE - VON NEUMANN

→ MATRIZ DENSIDADE

EM UMA BASE $\{|a_n\rangle\}$, SE

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|a_n\rangle,$$

$$\rho_{ij} = \langle a_i|\rho|a_j\rangle = \langle a_i|\psi\rangle\langle\psi|a_j\rangle$$

$$\therefore \boxed{\rho_{ij} = c_i c_j^*}$$

PURO!

→ MÉDIA DE OBSERVÁVEL

$$\langle A\rangle_\psi = \sum_n a_n \mathbb{P}(a_n) = \sum_n a_n c_n c_n^* =$$

$$= \sum_n a_n \rho_{nn} = \sum_n a_n \langle a_n|\rho|a_n\rangle =$$

$$= \sum_n a_n \langle a_n|\psi\rangle\langle\psi|a_n\rangle =$$

$$= \sum_n \langle a_n| \rho \, [a_n |a_n\rangle] =$$

$$= \sum_n \langle a_n| \rho \, [A |a_n\rangle] =$$

$$= \sum_n \langle a_n| \rho A |a_n\rangle$$

$$\therefore \boxed{\langle A\rangle_\psi = \mathrm{Tr}(\rho A)}$$

"MÉDIAS POR INTEGRAÇÕES C/ UMA DENSIDADE"

→ NORMALIZAÇÃO $\boxed{\mathrm{Tr}\,\rho = 1}$

$$= \sum_n |c_n|^2 = 1$$

PURO: $\rho^2 = [|\psi\rangle\langle\psi|][|\psi\rangle\langle\psi|]$

$$= |\psi\rangle \underbrace{[\langle\psi|\psi\rangle]}_{=1} \langle\psi| = \rho$$

$\boxed{\mathrm{Tr}\,\rho^2 = 1}$ PURO!

*** ESTADOS MISTOS, ρ GERAL**

O QUE OCORRE SE O PRÓPRIO ESTADO DO SISTEMA FOR INCERTO?

DIGAMOS QUE CADA VETOR DE ESTADO

$$\boxed{|\psi^{K}\rangle = \sum_{n} c_n^K |a_n\rangle}$$

TENHA PROBABILIDADE p_K DE SER AQUELE QUE DESCREVE O SISTEMA.

$$\boxed{p_K \geq 0 \; ; \; \sum_K p_K = 1}$$

SE $p_K < 1 \; \forall K$, TEMOS UMA MISTURA ESTATÍSTICA (STATISTICAL MIXTURE) E ADOTAMOS O NOME ESTADO MISTO MESMO QUE NÃO EXISTA UM VETOR DE ESTADO QUE CONTENHA A MESMA INFORMAÇÃO.

PELA LEI DA PROBABILIDADE TOTAL, A PROBABILIDADE DE MEDIRMOS a_n NO OBSERVÁVEL A É

$$\boxed{\mathbb{P}(a_n) = \sum_K \mathbb{P}(a_n|K) \cdot p_K = \sum_K p_K \cdot |c_n^K|^2} \, .$$

EM CONTRASTE, CASO ALGUÉM TENTASSE DEFINIR UM VETOR DE ESTADO $|\psi_{EQ}\rangle$ EQUIVALENTE À MISTURA,

$$|\psi_{EQ}\rangle = \sum_K \lambda_K |\psi_K\rangle \quad ,$$

COM ALGUM CONJUNTO $\{\lambda_K\}$ DE COEFICIENTES,

$$\mathbb{P}_{EQ}(a_n) = |\langle a_n|\psi_{EQ}\rangle|^2 = \left|\sum_K \lambda_K \langle a_n|\psi_K\rangle\right|^2$$

$$= \left|\sum_K \lambda_K c_n^K\right|^2 =$$

$$= \sum_K |\lambda_K|^2 . |c_n^K|^2 + \sum_{K' \neq K''} \lambda_{K'} \lambda^*_{K''} c_n^{K'} (c_n^{K''})^* \, .$$

TERMOS DE INTERFERÊNCIA

EM GERAL, $\mathbb{P}(a_n)$ E $\mathbb{P}_{EQ}(a_n)$ SÃO IRRECONCILIÁVEIS.

CONTUDO, EMBORA NÃO EXISTA $|\psi_{EQ}\rangle$, EXISTE UM <u>OPERADOR</u> <u>DENSIDADE</u> QUE APRESENTA ÓTIMAS PROPRIEDADES:

$$\boxed{\rho \equiv \sum_K p_K \cdot \rho_K = \sum_K p_K |\psi^K\rangle\langle\psi^K|}$$

TRATA-SE DE UMA COMBINAÇÃO <u>CONVEXA</u> DOS OPERADORES DENSIDADE DE CADA UM DOS ESTADOS PUROS QUE CONSTITUEM A MISTURA.

VEJAMOS, POR EXEMPLO, QUANTO VALE $Tr(\rho P_n)$, ONDE

$$\boxed{P_n \equiv |a_n\rangle\langle a_n|}$$

É O "PROJETOR" (OPERADOR DE PROJEÇÃO) NO SUBESPAÇO DO AUTO-ESTADO $|a_n\rangle$ DE A.

$$Tr(\rho P_n) = \sum_l \langle a_l|\rho P_n|a_l\rangle =$$

$$= \sum_l \langle a_l| \left\{ \sum_K p_K |\psi_K\rangle\langle\psi_K| \right\} \left\{ |a_n\rangle\langle a_n| \right\} |a_l\rangle =$$

$$= \sum_l \sum_K p_K \langle a_l|\psi_K\rangle\langle\psi_K|a_n\rangle\langle a_n|a_l\rangle =$$

$$= \sum_K p_K \langle\psi_K|a_n\rangle\langle a_n| \underbrace{\left\{ \sum_l |a_l\rangle\langle a_l| \right\}}_{= I} |\psi_K\rangle$$

$$= \sum_K p_K \langle a_n|\psi_K\rangle\langle\psi_K|a_n\rangle =$$

$$= \sum_K p_K \, c_n^K (c_n^K)^*$$

$$= \sum_K p_K . |c_n^K|^2 = \mathbb{P}(a_n) . \quad \therefore \boxed{\mathrm{Tr}\, \rho P_n = \mathbb{P}(a_n)}$$

ÓTIMO, POIS USANDO A DECOMPOSIÇÃO ESPECTRAL DO OBSERVÁVEL A,

$$\boxed{A = \sum_n a_n P_n = \sum_n a_n |a_n\rangle\langle a_n|} ,$$

$$\mathrm{Tr}(\rho A) = \sum_n a_n . \mathrm{Tr}(\rho P_n) = \sum_n a_n \mathbb{P}(a_n) = \langle A\rangle_\rho$$

$$\boxed{\mathrm{Tr}(\rho A) = \langle A\rangle_\rho}$$

PELO CARÁTER LINEAR DA COMBINAÇÃO CONVEXA QUE DEFINE ρ, É FÁCIL VERIFICAR QUE AINDA

$$\boxed{\mathrm{Tr}\rho = 1} \quad \text{E} \quad \boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[H, \rho]} .$$

PORÉM, SE $\rho_{ij} = c_i c_j^*$ EM UM ESTADO PURO,

$$\rho_{ij} = \langle a_i | \left\{ \sum_K p_K \rho_K \right\} | a_j \rangle$$
$$= \sum_K p_K \underbrace{c_i^K (c_j^K)^*}$$

COMPLEXO, FASE!

EM UM ESTADO MISTO E A INTERFERÊNCIA ENTRE AUTO-ESTADOS DISTINTOS PODE DESAPARECER MEDIANTE UMA MÉDIA EM UM ENSEMBLE $\{p_K\}$. É EXATAMENTE ISSO QUE ACONTECE QUANDO UM SISTEMA DE INTERESSE, "PEQUENO", MESMO QUE INICIALMENTE EM UM ESTADO PURO, DE SUPERPOSIÇÃO ("GATO DE SCHRÖDINGER"), EVOLUI PARA UM ESTADO TÉRMICO DE EQUILÍBRIO, UMA MISTURA ESTATÍSTICA, AO INTERAGIR COM UM RESERVATÓRIO TÉRMICO. TIPICAMENTE, NÃO SE OBSERVA

INTERFERÊNCIA EM ESTADOS MACROSCÓPICOS DE EQUILÍBRIO.

ALÉM DISSO, $\boxed{Tr\,\rho^2 < 1}$ PARA ESTADOS MISTOS. USAREMOS A DESIGUALDADE DE CAUCHY-SCHWARZ,

$$\boxed{|\langle u|v\rangle|^2 \leq \langle u|u\rangle . \langle v|v\rangle},$$

IGUALDADE APENAS P/ $u = \lambda . v$

ESPECIALIZADA COMO

$$\boxed{|\langle \psi_k|\psi_{k'}\rangle|^2 \leq 1}.$$

$\langle \psi_k|\psi_k\rangle = 1$

$\langle \psi_k|\psi_{k'}\rangle = ?$

$$Tr\,\rho^2 = \sum_\ell \langle a_\ell| \left\{ \sum_k p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| \right\} \left\{ \sum_{k'} p_{k'} |\psi_{k'}\rangle\langle\psi_{k'}| \right\} |a_\ell\rangle$$

$$= \sum_{k,k'} p_k p_{k'} \langle\psi_k|\psi_{k'}\rangle \langle\psi_{k'}| \underbrace{\left\{ \sum_\ell |a_\ell\rangle\langle a_\ell| \right\}}_{= I} |\psi_k\rangle =$$

$$= \sum_{k,k'} p_k p_{k'} |\langle\psi_k|\psi_{k'}\rangle|^2 \leq$$

$$\leq \sum_{k,k'} p_k \cdot p_{k'} = \left(\sum_k p_k\right)\left(\sum_{k'} p_{k'}\right) = 1 . 1 = 1$$

ESTADO PURO $\iff Tr\,\rho^2 = 1$

A EVOLUÇÃO TEMPORAL DE ESTADOS PUROS TAMBÉM PODE SER DADA POR

$$\boxed{\rho(t) = U(t_0,t)\,\rho(t_0)\,U^{\dagger}(t_0,t)},$$

ONDE $U(t_0,t) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$, COMO ANTERIORMENTE.

"DESVIOS DA PUREZA" TAMBÉM PODEM SER MEDIDOS COM A ENTROPIA DE VON NEUMANN,

$$\boxed{S = -k_B \, \mathrm{Tr}(\rho \log \rho)},$$

QUE VIABILIZA A FORMULAÇÃO DE UM PRINCÍPIO DE MÁXIMA ENTROPIA (SOB RESTRIÇÕES) TAMBÉM PARA SISTEMAS QUÂNTICOS.

POR FIM, QUALQUER OPERADOR

EM $\mathcal{H}$ QUE SATISFAÇA A NORMALIZAÇÃO $\mathrm{Tr}\,\rho = 1$ E SEJA POSITIVO DEFINIDO ($\langle\varphi|\rho|\varphi\rangle \geq 0 \;\; \forall \varphi \in \mathcal{H}$) É O OPERADOR DENSIDADE DE ALGUM ENSEMBLE $\{p_k, |\psi_k\rangle\}$.

É PRECISO CUIDADO/ATENÇÃO COM MÁS INTERPRETAÇÕES EM REPRESENTAÇÕES PARTICULARES, EM BASES ESPECÍFICAS. A MESMA MATRIZ DENSIDADE

$$\rho = \frac{3}{4}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{4}|1\rangle\langle 1|$$

EMERGE DO ENSEMBLE $\left\{\frac{3}{4}, |0\rangle; \frac{1}{4}, |1\rangle\right\}$

E DO ENSEMBLE $\left\{\frac{1}{2}, |\phi_A\rangle; \frac{1}{2}, |\phi_B\rangle\right\}$ COM

$$|\phi_A\rangle = \sqrt{\frac{3}{4}}\,|0\rangle + \sqrt{\frac{1}{4}}\,|1\rangle$$

E

$$|\phi_B\rangle = \sqrt{\frac{3}{4}}\,|0\rangle - \sqrt{\frac{1}{4}}\,|1\rangle.$$