

Ricardo de Godoy

***ESPAÇO DE HILBERT E QUANTIFICAÇÃO
DE EMARANHAMENTO VIA ENTROPIA
NÃO EXTENSIVA***

São José do Rio Preto – SP

22 de dezembro de 2005

Ricardo de Godoy

***ESPAÇO DE HILBERT E QUANTIFICAÇÃO
DE EMARANHAMENTO VIA ENTROPIA
NÃO EXTENSIVA***

Dissertação apresentada ao Instituto de Biociências,
Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual
Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Campus de São
José do Rio Preto, São Paulo, para a obtenção do título
de Mestre em Matemática Aplicada.

Orientador: **Prof. Dr. Manoel Ferreira Borges Neto**

São José do Rio Preto - SP

22 de dezembro de 2005

Godoy, Ricardo de.

Espaço de Hilbert e Quantificação de Emaranhamento
via Entropia não Extensiva / Ricardo de Godoy. - São
José do Rio Preto : [s.n.], 2005

96 f. ; 30 cm.

Orientador: Manoel Ferreira Borges Neto

*Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual
Paulista. Instituto de Biociências, Letras e Ciências
Exatas*

1. Ótica quântica. 2. Emaranhamento quântico. 3.
Tsallis, Entropia de. I. Borges Neto, Manoel. II.
Universidade Estadual Paulista. Instituto de Biociências,
Letras e Ciências Exatas. III. Título.

CDU - 535.14

Dissertação apresentada ao Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Campus de São José do Rio Preto, São Paulo, para a obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada.

Mestrando: ***Ricardo de Godoy***

Data: *16 de dezembro de 2005*

Horário: *9:00 h*

Local: Sala de Seminários “ 1N ”

Título: ***“ESPAÇO DE HILBERT E
QUANTIFICAÇÃO DE EMARANHAMENTO
VIA ENTROPIA NÃO EXTENSIVA”***

Banca Examinadora	Instituição	Conceito
<i>Prof. Dr. Manoel Ferreira Borges Neto</i> (orientador)	DCCE-IBILCE UNESP	APROVADO
<i>Prof. Dr. José Márcio Machado</i>	DCCE-IBILCE UNESP	APROVADO
<i>Prof. Dr. Gilberto Aparecido Pratavia</i>	DF – UFSCar	APROVADO

Agradecimentos

A Deus por me permitir compartilhar a vida com minha família.

A minha querida esposa Maira, minha grande amiga e companheira, por todos estes anos de amor, compreensão, carinho, apoio e pela paciência que teve durante este mestrado.

Aos meus filhos Ricardo e Helena, por me ensinarem o verdadeiro significado do amor.

Aos meus pais pelos cuidados, pela imensa dedicação, amor, incentivo e pelo exemplo de que é sempre tempo de aprender.

Ao meu irmão Junior, pelo exemplo, apoio e motivação.

Ao prof. Borges pela orientação e confiança.

Ao prof. Lauro pelo muito que me ensinou.

Ao meu grande amigo “Capeta”, pela imensa ajuda, disponibilidade e pelo “dialético aprendizado”.

A Cris e a Carol pela amizade nestes dois anos.

Resumo

Em considerando-se dois subsistemas **A** e **B** com espaço de estados $\mathbf{H}_A$ e $\mathbf{H}_B$ e com o espaço do sistema total (**A+B**) associado ao produto tensorial $\mathbf{H}_A \otimes \mathbf{H}_B$, alguns vetores desse sistema total podem ser decompostos em um produto tensorial de dois vetores descrevendo o estado do sistema **A** e **B**. Quando essa decomposição não é possível, diz-se que os subsistemas estão *emaranhados*.

Uma medida de emaranhamento utilizada é a entropia de von Neumann de um dos subsistemas. Neste trabalho utiliza-se a entropia de Tsallis, uma generalização da entropia de von Neumann, como medida de emaranhamento. Faz-se uma comparação entre essas duas entropias como medida do emaranhamento entre campos emergentes de um divisor de feixes óticos.

Abstract

Let $\mathbf{A}$ and $\mathbf{B}$ be two subsystems with space of states $\mathbf{H}_\mathbf{A}$ and $\mathbf{H}_\mathbf{B}$ respectively, being the space of the total system $(\mathbf{A} + \mathbf{B})$ associated to the tensorial product $\mathbf{H}_\mathbf{A} \otimes \mathbf{H}_\mathbf{B}$; some vectors of the total system may be decomposed in a tensorial product of two vectors describing the state of system $\mathbf{A}$ and $\mathbf{B}$. When this decomposition is not possible, we say that the subsystems are *entangled*.

An usual measure of entanglement used in each one of the subsystems is called von Neumann entropy. In this work we use Tsallis' entropy, a generalization of the von Neumann's measure to entanglement. We compare the two entropies as a measure of the entanglement between emerging fields of an optical beam splitter.

Sumário

Resumo	i
Abstract	ii
Introdução	08
1 Espaço de Hilbert e Formalismo de Dirac	11
1.1 Espaços L^p	11
1.2 Espaços L^2	12
1.3 Espaço de Hilbert e a Mecânica Quântica	22
2 Oscilador Harmônico Quântico	38
2.1 Oscilador Harmônico Clássico e Quântico	38
2.2 Autovalores do Hamiltoniano	40
2.3 Autoestados do Hamiltoniano	50
3 Operador Densidade	57
3.1 Estado Puro – Introdução do Operador Densidade	57
3.2 Mistura Estatística de Estados (caso não puro)	61
3.3 Descrição de parte de um sistema físico	64
3.4 Pureza, Entropia Linear e Emaranhamento	66
4 Divisor de feixes (sem absorção)	69
4.1 A matriz transformação do divisor de feixes	69
5 Emaranhamento no divisor de feixes	77
5.1 Ação do divisor de feixes	77
5.2 As entropias	79
5.3 Análise dos resultados	85

6	Conclusões e Perspectivas	87
	Referências	89
	Apêndice A : Campos de saída	92

Introdução

Atualmente tem-se dado muita atenção a sistemas físicos emaranhados. Aliás, muitos problemas conceituais na mecânica quântica envolvem emaranhamento quântico. O mais famoso destes problemas é o paradoxo EPR [1]. O paradoxo ilustra o significado fundamental dos emaranhados quânticos, em que uma medida de um observável em um dos sistemas correlacionados, determina o resultado da propriedade correspondente na outra parte do sistema. Este “colapso” da função de onda ocorre independente da distância entre os dois sistemas.

Consideremos um par de sistemas quânticos rotulados pelos índices *1* e *2*. O operador densidade reduzido descrevendo as propriedades do sistema *1* (*2*) é obtida fazendo o traço no operador densidade total ρ sobre o sistema *2* (*1*). Portanto,

$$\rho_{1(2)} = \text{Tr}_{2(1)} [\rho]$$

Os sistemas *1* e *2* estão emaranhados se a medida de um observável do sistema *1* (*2*), projeta o sistema *2* (*1*) em um novo estado. A não ocorrência deste fato implica que as propriedades estatísticas dos dois sistemas são independentes. Neste caso, os sistemas não estão emaranhados. Para sistemas não emaranhados, o operador densidade, do sistema total, pode ser escrito como um produto tensorial dos operadores densidades dos sistemas separados, ou seja,

$$\rho = \rho_1 \otimes \rho_2$$

Contudo, se tal fatorização não for possível, o sistema está emaranhado.

Estados emaranhados desempenham papel fundamental no desenvolvimento do processamento de informação quântica [5], permitindo aumentar a capacidade de transporte de informações [6], bem como melhorar a sua eficiência [7]. O emaranhamento pode ser a chave para a segurança na comunicação, através da criptografia quântica [2]. Geralmente, estas aplicações produzem melhores efeitos com estados quânticos puros com emaranhamento máximo. Em particular, avanços

experimentais têm permitido a produção de fótons polarizados e emaranhados em um espaço de Hilbert de dimensão (2×2) [17].

Um divisor de feixe é um dos poucos dispositivos experimentalmente acessível que pode atuar como um emaranhador [3,15,18,19]. Neste trabalho, nós investigamos as propriedades de emaranhamento de um divisor de feixe para campos de entrada que estão nos “estados de Fock”. Tais estados, além da importância teórica, já podem ser obtidos em experimentos envolvendo íons em cavidades ópticas [22].

Nesta investigação, um problema importante é a quantificação do grau de emaranhamento; ou seja, de caracterizar o quanto o estado de um sistema é separável ou não. Sabe-se que para sistemas com duas componentes num estado total puro, o operador densidade descrevendo um dos sistemas será misto. Nesse caso, a medida da pureza de uma das partes nos diz se o sistema total é emaranhado ou não. Uma “medida” pureza é a entropia. Esta dentro da interpretação estatística de Boltzmann é função crescente com o emaranhamento, ou seja, com os estados acessíveis ao sistema. Desta forma quanto maior a entropia de uma das partes, maior o grau de emaranhamento do sistema conjunto.

A entropia dada por Boltzmann na mecânica estatística clássica, tem seu equivalente na mecânica quântica conhecida como entropia de von Neumann [12]. A entropia de von Neumann associada com o estado quântico de um sistema descrito pelo operador densidade ρ é

$$S = - \text{Tr} [\rho \ln \rho] .$$

Recentemente Tsallis [10], propôs uma generalização da entropia de Boltzmann, cuja versão na mecânica quântica é:

$$S_q = - \frac{1 - \text{Tr} [\rho^q]}{1 - q} .$$

O índice entrópico q é um parâmetro real, o qual está relacionado com as propriedades (não extensivas) do sistema físico. No limite em que $q \rightarrow 1$, a entropia de von Neumann é obtida. A entropia de Tsallis tem sido aplicada com sucesso em vários problemas envolvendo sistemas não extensivos, os quais não são bem descritos pela estatística de Boltzmann. Dentre eles, podemos citar a superdifusão Lévy [11], turbulência em plasma de elétrons-puros [4] e análise da radiação de corpo negro [9]. Existem valores ou intervalos de valores mais convenientes para o índice q dependendo do problema a ser tratado.

Neste trabalho, iremos comparar grau de emaranhamento produzido pelo divisor de feixe utilizando a entropia de von Neumann e de Tsallis, verificando desta forma qual das duas oferece um maior grau de informação sobre os campos de saída do divisor.

Deve-se salientar que o caso em que o sistema total se encontra em um estado misto ou é composto da soma de dois sistemas não existe um critério geral para caracterizar o grau de emaranhamento. Como exemplo de um critério alternativo, podemos citar o “*parâmetro de covariância de emaranhamento*” proposto por V.V. Dodonov, A. S. M. de Castro e S. S. Mizrahi [28].

Capítulo 1

Espaço de Hilbert e Formalismo de Dirac

Neste capítulo estudaremos o espaço de Hilbert que é um espaço de Banach (espaço normado) [24], cuja norma provém de um produto interno. Neste espaço encontraremos um subespaço formado pelas “funções de onda” que descrevem os estados de um sistema quântico. Apresentaremos também o formalismo de Dirac, que constitui uma poderosa ferramenta matemática no estudo da mecânica quântica.

1 - INTRODUÇÃO

1.1 – Espaços L^p

DEFINIÇÃO 1.1 : Seja (Ω, Σ, μ) um espaço mensurável, p um número real fixo, $p \geq 1$. Definimos $L^p = L^p(\Omega, d\mu)$ pelo conjunto de todas as funções mensuráveis $f: \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ tal que $|f|^p$ é integrável com respeito a μ , isto é, $|f|^p \in L^1$, e para $f \in L^p$ definimos a norma de f como sendo:

$$\|f\|_p = \left(\int |f|^p d\mu \right)^{\frac{1}{p}} \quad (1.1)$$

É fácil verificar que essa definição de norma satisfaz as três propriedades abaixo:

$$\begin{aligned} \text{i)} \quad & \| \lambda f \|_p = |\lambda| \| f \|_p; \\ \text{ii)} \quad & \| f + g \|_p \leq \| f \|_p + \| g \|_p; \\ \text{iii)} \quad & \| f \|_p = 0 \text{ se } f(x) = 0 \text{ para todo } x. \end{aligned} \quad (1.2)$$

1.2 - Espaços L^2

Seja H um espaço vetorial sobre o corpo $\mathbb{C}$. Um produto interno de H é uma função $(\cdot, \cdot)$ definida em $H \times H$ e tomando valores em $\mathbb{C}$, satisfazendo as seguintes condições para todos $x, y, z \in H$ e $\lambda \in \mathbb{C}$:

$$\begin{aligned} 1- & (x, x) \geq 0 \text{ e } (x, x) = 0 \text{ se e somente se } x = 0 \\ 2- & (x + y, z) = (x, z) + (y, z) \\ 3- & (\lambda x, y) = \lambda (x, y) \\ 4- & (x, y) = \overline{(y, x)} \end{aligned} \quad (1.3)$$

Um espaço vetorial munido de um produto interno diz-se um espaço *prehilbertiano*. Resulta das condições acima que num espaço prehilbertiano também

$$(x, y + z) = (x, y) + (x, z) \quad \text{e} \quad (x, \lambda y) = \overline{\lambda} (x, y) \quad (1.4)$$

para todos $x, y, z \in H$ e $\lambda \in \mathbb{C}$.

PROPOSIÇÃO 1.1 - (Desigualdade de Cauchy – Schwarz) –

Seja H um espaço prehilbertiano. Se $x, y \in H$, então:

$$| (x, y) |^2 \leq (x, x) (y, y) \quad (1.5)$$

PROVA: Dados $x, y \in H$ e $\lambda \in \mathbb{R}$ temos

$$0 \leq (x - \lambda y, x - \lambda y) = (x, x) - 2\lambda \operatorname{Re} (x, y) + \lambda^2 (y, y)$$

Como isto vale para todo $\lambda \in \mathbb{R}$ terá que ser

$$(\operatorname{Re}(x, y))^2 \leq (x, x) (y, y)$$

Se $(x, y) \geq 0$, temos provado o resultado. Caso contrário, existe $\alpha \in \mathbb{C}$ com $|\alpha| = 1$ tal que $\alpha(x, y) \geq 0$. Substituindo x por αx no argumento acima obtemos

$$(\operatorname{Re}(\alpha x, y))^2 \leq (\alpha x, \alpha x)(y, y) = \alpha \bar{\alpha} (x, x)(y, y) = (x, x)(y, y)$$

Como

$$|(x, y)| = |(\alpha(x, y))| = \alpha(x, y) = \operatorname{Re}(\alpha x, y),$$

concluimos que $|(x, y)|^2 \leq (x, x)(y, y)$

PROPOSIÇÃO 1.2 - A função $x \in H \mapsto \|x\| = (x, x)^{\frac{1}{2}}$ define uma norma em H

PROVA: Com exceção da desigualdade triangular, as outras propriedades (1.2) são de verificação imediata. Vejamos que $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ para todo $x, y \in H$. Temos

$$\begin{aligned} \|x + y\|^2 &= (x + y, x + y) \\ &= \|x\|^2 + (x, y) + (y, x) + \|y\|^2 \\ &= \|x\|^2 + 2 \operatorname{Re}(x, y) + \|y\|^2 \\ &\leq \|x\|^2 + 2 |(x, y)| + \|y\|^2 \end{aligned}$$

Usando a Desigualdade de Cauchy – Schwarz obtemos

$$\|x + y\|^2 \leq \|x\|^2 + 2 \|x\| \|y\| + \|y\|^2 = (\|x\| + \|y\|)^2$$

ficando assim provado o que pretendíamos.

Se o espaço prehilbertiano H com a métrica dada por esta norma é completo, dizemos que H é um **espaço de Hilbert**. Ou seja, um espaço de Hilbert é um **espaço de Banach** (espaço normado) cuja norma provém de um produto interno.

EXEMPLO 1 - Dado o espaço de medida (Ω, Σ, μ) , consideremos em $L^2(\mu)$ o produto interno

$$(f, g) = \int \bar{f} g d\mu \quad (1.6)$$

Notar que este produto está bem definido, uma vez que se $f \in L^2(\mu)$ também $\bar{f} \in L^2(\mu)$ e portanto, pela desigualdade de Hölder [24], $\bar{f}g \in L^1(\mu)$. Este produto interno dá origem à norma $\|\cdot\|_2$ em $L^2(\mu)$, e portanto $L^2(\mu)$ é um espaço de Hilbert.

1.2.1 - Ortogonalidade

Um vetor x num espaço prehilbertiano H diz-se *ortogonal* a $y \in H$, e em tal caso escreve-se $x \perp y$, se $(x, y) = 0$. Um subconjunto $S \subset H$ diz-se *ortonormal* se $(x, x) = 1$ e $(x, y) = 0$ para todos $x, y \in H$ com $x \neq y$.

TEOREMA 1.1 (Pitágoras) - Se $\{x_i\}_{i=1}^n$ é um conjunto ortonormal num espaço prehilbertiano H , então para todo $x \in H$

$$\|x\|^2 = \sum_{i=1}^n |(x, x_i)|^2 + \|x - \sum_{i=1}^n (x, x_i) x_i\|^2 \quad q(1.7)$$

PROVA: Escrevemos

$$x = \sum_{i=1}^n (x, x_i) x_i + x - \sum_{i=1}^n (x, x_i) x_i$$

Podemos verificar facilmente que os vetores

$$\sum_{i=1}^n (x, x_i) x_i \text{ e } x - \sum_{i=1}^n (x, x_i) x_i$$

são ortogonais. Logo

$$\begin{aligned} (x, x) &= \left\| \sum_{i=1}^n (x, x_i) x_i \right\|^2 + \left\| x - \sum_{i=1}^n (x, x_i) x_i \right\|^2 \\ &= \sum_{i=1}^n |(x, x_i)|^2 + \left\| x - \sum_{i=1}^n (x, x_i) x_i \right\|^2 \end{aligned}$$

ficando assim provado o resultado.

COROLÁRIO 1.1 - Se $\{x_i\}_{i=1}^n$ é um conjunto ortonormal num espaço prehilbertiano H , então para todo $x \in H$

$$\|x\|^2 \geq \sum_{i=1}^n |(x, x_i)|^2 \quad (1.8)$$

Dado um subconjunto S de um espaço prehilbertiano H , definimos como o *ortogonal* de S como

$$S^\perp = \{x \in H : (x, y) = 0 \ \forall y \in S\} \quad (1.9)$$

LEMA 2.1 - Sejam H um espaço de Hilbert e F um subespaço vetorial fechado de H . Dado $x \in H$, existe um único elemento $z \in F$ tal que:

$$\|x - z\| = \min_{y \in F} \|x - y\| \quad (1.10)$$

PROVA: Sejam $d = \inf_{y \in F} \|x - y\|$ e $(y_n)_n$ uma sucessão de elementos em F com $\|x - y_n\|$ convergindo para d . Temos

$$\|y_m - y_n\|^2 = \|(y_m - x) + (x - y_n)\|^2$$

Usando a regra do paralelogramo obtemos

$$\begin{aligned} \|y_m - y_n\|^2 &= 2\|y_n - x\|^2 + 2\|y_m - x\|^2 - \|2x - (y_m + y_n)\|^2 \\ &= 2\|y_n - x\|^2 + 2\|y_m - x\|^2 - 4\|x - 0,5(y_m + y_n)\|^2 \\ &\geq 2\|y_n - x\|^2 + 2\|y_m - x\|^2 - 4d^2 \end{aligned}$$

Como esta última expressão converge para $2d^2 + 2d^2 - 4d^2 = 0$ quando $m, n \rightarrow \infty$, temos que $(y_n)_n$ é uma sucessão de Cauchy. Sendo F fechado, $(y_n)_n$ converge para algum $z \in F$. Pela escolha da sucessão $(y_n)_n$ é claro que $\|x - z\| = d$. Se z' é outro elemento de F tal que $\|x - z'\| = d$ então pela regra do paralelogramo

$$2\|x - z\|^2 + 2\|x - z'\|^2 = \|z - z'\|^2 + \|2x - z - z'\|^2$$

Temos assim

$$2d^2 + 2d^2 = \|z - z'\|^2 + 4\|x - 0,5(z + z')\|^2$$

Como $0,5 (z + z') \in F$, temos que $\|x - 0,5 (z + z')\| \geq d$, e portanto $\|z - z'\| = 0$.

Como facilmente se pode observar na prova do lema anterior, não é necessário exigir que F seja um subespaço vetorial de um espaço de Hilbert. De fato, basta que F seja um subconjunto convexo completo de um espaço de prehilbertiano.

TEOREMA 1.2- Sejam H um espaço de Hilbert e F um subespaço fechado de H .

Todo $x \in H$ pode ser escrito de maneira única como $x = z + w$ com $z \in F$ e $w \in F^\perp$.

PROVA: Seja $x \in H$. Pelo lema anterior existe $z \in F$ a distância mínima de x . Tomando $w = x - z$, temos claramente $x = z + w$. Fazendo $d = \|x - z\|$ temos para todo $y \in F$ e todo $\lambda \in \mathbb{R}$,

$$d^2 \leq \|x - (z + \lambda y)\|^2 = \|w - \lambda y\|^2 = d^2 - 2\lambda \operatorname{Re}(w, y) + \lambda^2 \|y\|^2$$

Assim,

$$-2\lambda \operatorname{Re}(w, y) + \lambda^2 \|y\|^2 \geq 0 \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}$$

Daqui resulta $\operatorname{Re}(w, y) = 0$. Usando λi em vez de λ de modo análogo se mostra que $\operatorname{Im}(w, y) = 0$, o que dá $(w, y) = 0$. Ou seja, $w \in F^\perp$.

Se $z' \in F$ e $w' \in F^\perp$ são tais que $x = z' + w'$, então $z - z' = w - w'$. Como $z - z' \in F$ e $w - w' \in F^\perp$, terá que ser $z = z'$ e $w = w'$.

Sejam H um espaço de Hilbert e F um subespaço fechado de H . O teorema anterior permite-nos definir a *projeção ortogonal* de H em F ,

$$\begin{aligned} P: H &\rightarrow F \\ x &\mapsto z \end{aligned} \quad (1.11)$$

onde z é o único elemento de F tal que $x = z + w$, com $w \in F^\perp$. Esta é uma aplicação linear contínua com $\|P\| = 1$ sempre que $F \neq \{0\}$.

Dado um espaço de Hilbert H e $y \in H$, as propriedades do produto interno mostram que a aplicação

$$\begin{aligned} (y, \cdot): H &\rightarrow \mathbb{C} \\ x &\mapsto (y, x) \end{aligned} \quad (1.12)$$

define um funcional linear em H . Além disso pela Desigualdade de Cauchy - Schwarz temos $|(y, x)| \leq \|x\| \|y\|$ e portanto $(y, \cdot) \in H^*$ (H^* é o

espaço dual de H), isto é, $(y, \cdot)$ é um funcional linear contínuo. O próximo resultado mostra que estes são os únicos funcionais lineares contínuos em H .

TEOREMA 1.3 (Lema de Riesz) - Seja H um espaço de Hilbert e $\Lambda \in H^*$ (H^* é o espaço dual de H). Existe um único $y \in H$ tal que $\Lambda(x) = (y, x)$ para todo $x \in H$. Além disso, $\|\Lambda\| = \|y\|$.

PROVA: Seja K o núcleo de Λ , isto é, o conjunto dos $x \in H$ tais que $\Lambda(x) = 0$. Pela continuidade de Λ temos que K é um subespaço fechado. Se $K = H$ temos $\Lambda(x) = (x, 0)$ para todo $x \in H$ e temos o resultado. Se $K \neq H$, então pelo Teorema 1.2, existe algum $w \in K^\perp \setminus \{0\}$. Mostraremos que $y = \frac{\overline{\Lambda(w)}}{\|w\|^2} w$, tem as propriedades requeridas. Se $x \in K$ então

$$\Lambda(x) = 0 = (x, y)$$

Se $x = \alpha w$ para algum $\alpha \in \mathbb{C}$ então

$$\Lambda(x) = \Lambda(\alpha w) = \alpha \Lambda(w) = (\alpha w, \frac{\overline{\Lambda(w)}}{\|w\|^2} w) = (x, y)$$

Como os funcionais Λ e $(\cdot, y)$ coincidem em K e w , devem coincidir no espaço gerado por K e w . Temos para todo $x \in H$

$$x = (x - \frac{\Lambda(x)}{\Lambda(w)} w) + \frac{\Lambda(x)}{\Lambda(w)} w, \text{ com } x - \frac{\Lambda(x)}{\Lambda(w)} w \in K$$

Assim, $\Lambda(x) = (x, y)$ para todo $x \in H$. Falta ver que $\|\Lambda\| = \|y\|$. Temos

$$\|\Lambda\| = \sup_{\|x\| \leq 1} |\Lambda(x)| = \sup_{\|x\| \leq 1} |(x, y)| \leq \sup_{\|x\| \leq 1} \|y\| \|x\| = \|y\|.$$

Por outro lado,

$$\|\Lambda\| = \sup_{\|x\| \leq 1} |\Lambda(x)| \geq |\Lambda(\frac{y}{\|y\|})| = (\frac{y}{\|y\|}, y) = \|y\|,$$

donde se conclui que terá de ser $\|\Lambda\| = \|y\|$.

NOTA: Para o espaço de Hilbert $L^2(\mu)$, temos que, dado $\Lambda \in (L^2(\mu))^*$, pelo Lema de Riesz existe algum $g \in L^2(\mu)$ tal que

$$\Lambda(f) = \int \bar{g} f d\mu \quad \text{para todo } f \in L^2(\mu) \quad (1.13)$$

Uma vez que o Lema de Riesz dá uma identificação entre um espaço de Hilbert H e o seu dual H^* , resulta que uma sucessão $(x_n)_n$ em H converge fracamente para $x \in H$ se e somente se $(y, x_n) \rightarrow (y, x)$ para todo $y \in H$.

1.2.2 – Bases Ortonormais

Dado um espaço de Hilbert H , dizemos que um subconjunto S de H é uma **base ortonormal** de H se S é um conjunto ortonormal maximal para a inclusão, isto é, S não está estritamente contido em nenhum outro conjunto ortonormal de H .

TEOREMA 1.4 – Todo espaço de Hilbert tem alguma base ortonormal

PROVA: Consideremos O a coleção de todos conjuntos ortonormais do espaço de Hilbert H , ordenado pela relação de inclusão. Assim, O é parcialmente ordenado e não vazio, uma vez que qualquer conjunto formado apenas por um vetor unitário é um conjunto ortonormal. Se $\{S_\alpha\}_{\alpha \in A}$ é uma família totalmente ordenada de elementos de O , então $\bigcup_{\alpha \in A} S_\alpha$ é um conjunto ortonormal que é um majorante para $\{S_\alpha\}_{\alpha \in A}$. Pelo Lema da Zorn (*LEMA DA ZORN: Seja A um conjunto não vazio parcialmente ordenado. Se todo subconjunto linearmente ordenado de A tem um limite superior, então A tem um elemento maximal*) concluímos que O tem algum elemento maximal..

LEMA 1.2 – Se $\{e_\alpha\}_{\alpha \in I}$ é um conjunto ortonormal, então para cada $x \in H$, existe no máximo uma infinidade numerável de índices $\alpha \in I$ tais que $(x, e_\alpha) \neq 0$.

PROVA: Para cada $n=1,2,\dots$ definimos

$$S_n = \{e_\alpha : |(x, e_\alpha)|^2 > \frac{\|x\|^2}{n}\}$$

Pelo Corolário 1.2, cada S_n tem no máximo $(n-1)$ elementos. Como o conjunto dos e_α para os quais $(x, e_\alpha) \neq 0$ é igual à união dos S_n , temos provado o resultado.

TEOREMA 1.5 - Seja H um espaço de Hilbert e $\{e_\alpha\}_{\alpha \in I}$ uma base ortonormal.

Então para cada $x \in H$

$$x = \sum_{\alpha \in I} (x, e_\alpha) e_\alpha \quad \text{e} \quad \|x\|^2 = \sum_{\alpha \in I} |(x, e_\alpha)|^2, \quad (1.14)$$

sendo o valor dessas somas independente da ordem das parcelas.

PROVA: Sabemos pelo Lema 1.2 que $(x, e_\alpha) \neq 0$ para no máximo uma infinidade numerável de valores de $\alpha \in I$, os quais ordenamos arbitrariamente por $\alpha_1, \alpha_2, \dots$

Como $\sum_{i=1}^n |(x, e_{\alpha_i})|^2$ é limitada, pelo Corolário 1.2 é monótona, então converge

para algum número real quando $n \rightarrow \infty$. Tomando $x = \sum_{i=1}^n (x, e_{\alpha_i}) e_{\alpha_i}$, temos para $n > m$

$$\|x_n - x_m\|^2 = \left\| \sum_{i=1}^n (x, e_{\alpha_i}) e_{\alpha_i} \right\|^2 = \sum_{i=m+1}^n |(x, e_{\alpha_i})|^2$$

Concluimos que $(x_n)_n$ é uma sucessão de Cauchy e portanto converge para algum $x' \in H$. Temos para cada $j \geq 1$

$$(x - x', e_{\alpha_j}) = \lim_{n \rightarrow \infty} (x - \sum_{i=1}^n (x, e_{\alpha_i}) e_{\alpha_i}, e_{\alpha_j}) = (x, e_{\alpha_j}) - ((x, e_{\alpha_j})) = 0$$

e se $\alpha \neq \alpha_j$ para todo $j \geq 1$, também temos

$$(x - x', e_\alpha) = \lim_{n \rightarrow \infty} (x - \sum_{i=1}^n (x, e_{\alpha_i}) e_{\alpha_i}, e_\alpha) = 0$$

Temos assim que $(x - x')$ e e_α são ortogonais para todo $\alpha \in I$. Como $\{e_\alpha\}_{\alpha \in I}$ é um conjunto ortonormal maximal deverá ser $x - x' = 0$, ou seja

$$x = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n (x, e_{\alpha_i}) e_{\alpha_i}$$

o que dá a primeira igualdade. Finalmente,

$$\begin{aligned}
\|x\|^2 &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\sum_{i=1}^n (x, e_{\alpha i}) e_{\alpha i}, \sum_{i=1}^n (x, e_{\alpha i}) e_{\alpha i} \right) \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n (x, e_{\alpha i}) \overline{(x, e_{\alpha i})} (e_{\alpha i}, e_{\alpha i}) \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n |(x, e_{\alpha i})|^2
\end{aligned}$$

o que dá a igualdade da norma.

TEOREMA 1.6 - Sejam H um espaço de Hilbert e $\{e_{\alpha}\}_{\alpha \in I}$ um conjunto ortonormal de elementos de H . As seguintes condições são equivalentes:

1. $\{e_{\alpha}\}_{\alpha \in I}$ é uma base ortonormal de H
2. As combinações lineares finitas de elementos de $\{e_{\alpha}\}_{\alpha \in I}$ são densas em H .
3. Se $x \in H$ é tal que $(x, e_{\alpha}) = 0$ para todo $\alpha \in I$, então $x = 0$

PROVA: Se $\{e_{\alpha}\}_{\alpha \in I}$ é uma base ortonormal de H , então pelo Teorema 1.5 resulta que qualquer elemento de H pode ser aproximado por uma combinação linear finita de elementos $\{e_{\alpha}\}_{\alpha \in I}$, e portanto temos a segunda condição.

Suponhamos agora que vale a segunda condição. Seja F o conjunto das combinações lineares finitas de elementos de $\{e_{\alpha}\}_{\alpha \in I}$. Se $x \in H$ é tal que $(x, e_{\alpha}) = 0$, para todo $\alpha \in I$, então também $(x, y) = 0$ para todo $y \in F$. Da densidade de F e da continuidade do produto interno, resulta que $(x, y) = 0$ para todo $y \in H$, e portanto $x = 0$.

Se vale a terceira condição, então é claro que $\{e_{\alpha}\}_{\alpha \in I}$ é um conjunto ortonormal maximal e, por definição, uma base de H .

Descrevemos a seguir o processo de **ortogonalização de Gram-Schmidt**, que permite a partir de um conjunto de vetores independentes construir um conjunto de vetores ortonormais que geram o mesmo espaço. Sejam $x_1, x_2, \dots$ vetores linearmente independente num espaço prehilbertiano. Definimos

$$y_1 = x_1 \qquad z_1 = y_1 / \|y_1\|$$

$$y_2 = x_2 - (z_1, x_2) z_1 \qquad z_2 = y_2 / \|y_2\|$$

$$\begin{array}{ccc}
 \cdot & & \cdot \\
 \cdot & & \cdot \\
 y_n = x_n - \sum_{k=1}^{n-1} (z_k, x_k) z_k & & z_n = y_n / \|y_n\| \\
 \cdot & & \cdot \\
 \cdot & & \cdot
 \end{array}$$

O conjunto de vetores $\{z_n\}_n$ é um conjunto ortonormal com a propriedade adicional de para cada $n = 1, 2, \dots$ os vetores $z_1, z_2, \dots, z_n$ gerarem o mesmo espaço que os vetores $x_1, x_2, \dots, x_n$. Em particular, o conjunto das combinações lineares finitas de vetores de $\{z_n\}_n$ coincide com o conjunto das combinações lineares finitas de vetores de $\{x_n\}_n$.

TEOREMA 1.7 – Um espaço de Hilbert tem uma base ortonormal numerável se e somente se esse espaço é separável.

PROVA: Seja $\{x_n\}_n$ um subconjunto numerável denso no espaço de Hilbert H . Podemos a partir daqueles vetores formar um subcoleção de vetores linearmente independente cujo conjunto das combinações lineares finita coincide com o conjunto das combinações lineares finitas de todos os x_n . Aplicando o processo de ortogonalização de Gram – Schmidt a este conjunto de vetores linearmente independente obtemos um conjunto ortonormal que, pelo Teorema 1.6, constitui uma base ortonormal de H .

Reciprocamente, se $\{e_n\}_n$ é uma base ortonormal numerável de H , o conjunto das combinações lineares finitas de vetores de $\{e_n\}_n$ com coordenadas em $\mathbb{C}$ é denso em H . Como este conjunto é numerável, H é separável.

TEOREMA 1.8 - Sejam H um espaço de Hilbert separável e N o cardinal de uma base ortonormal de H .

1. Se N é finito, então H é isometricamente isomorfo a $\mathbb{C}^N$.
2. Se N é infinito, então H é isometricamente isomorfo a $\ell^2(\mathbb{N})$, onde

$$\ell^2(\mathbb{N}) = \{a : \|a\|_2 \equiv \left(\sum_{k \in \mathbb{N}} |a_k|^2 \right)^{1/2} < \infty\}$$

PROVA: Seja $\{e_n\}_{n=1}^N$ uma base ortonormal de H . Se $N = \infty$, consideremos a aplicação linear

$$\begin{array}{ll}
 U : H & \rightarrow \ell^2(\mathbb{N}) \\
 x & \rightarrow \{(x, e_n)\}_n
 \end{array}$$

Pelo Teorema 1.5, U está bem definida, é injetiva e preserva as normas. Falta ver a sobrejetividade de U . Dado $(a_n)_n \in \ell^2(\mathbb{N})$ definimos $x_n = \sum_{i=1}^n a_i e_i$. Analogamente ao que fizemos seção 1.1, podemos provar que $\{x_n\}_n$ é uma sucessão de Cauchy.

Se $x \in H$ é o limite da sucessão $\{x_n\}_n$, então para cada $m \in \mathbb{N}$

$$(x, e_m) = \left(\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n a_i e_i, e_m \right) = a_m$$

Ou seja, $U(x) = (a_n)_n$. Se N é finito, de modo análogo se prova que a aplicação

$$\begin{aligned} U: H &\rightarrow \mathbb{C}^N \\ x &\rightarrow \{(x, e_1), (x, e_2), \dots, (x, e_N)\} \end{aligned}$$

é um isomorfismo linear que preserva as normas.

1.3 – Espaço de Hilbert e a Mecânica Quântica

1.3.1 - Introdução ao formalismo da Mecânica Quântica

Como consequência da dualidade ONDA – PARTÍCULA, nós somos obrigados a rever algumas concepções:

- O conceito clássico de *trajetória*, deve ser substituído pelo conceito de *estado variável com o tempo*. O estado quântico de uma partícula, como um elétron, é caracterizado por uma *função de onda* $\psi(r,t)$, a qual contém toda informação possível de se obter da partícula.
- $\psi(r,t)$ é interpretada como a *amplitude de probabilidade da presença da partícula*. Desde que sejam contínuas as possíveis posições da partícula, a

probabilidade $dP(\mathbf{r},t)$ de uma partícula estar, no instante t , no elemento de volume $d^3r = dx dy dz$, situado em um ponto $\mathbf{r}$ deve ser proporcional a d^3r e portanto, infinitesimal. $|\psi(\mathbf{r},t)|^2$ é interpretado como a correspondente *densidade de probabilidade*, com

$$dP(\mathbf{r},t) = C |\psi(\mathbf{r},t)|^2 d^3r \quad (1.15)$$

onde C é uma constante de normalização.

COMENTÁRIOS:

Para um sistema composto de uma única partícula, a probabilidade total de achar a partícula em algum lugar do espaço, num dado instante t , é igual a 1:

$$\int dP(\mathbf{r},t) = 1 \quad (1.16)$$

Como $dP(\mathbf{r},t)$ é dada pela fórmula (1.15), concluímos que a *função de onda* $\psi(\mathbf{r},t)$ deve ser *quadrado integrável*, ou seja :

$$\int |\psi(\mathbf{r},t)|^2 d^3r \quad \text{é FINITA} \quad (1.17)$$

Portanto as funções de onda $\psi(\mathbf{r},t)$ pertencem ao *Espaço de Hilbert*.

É evidente que o conjunto de funções contidas no Espaço de Hilbert é extremamente extenso. No entanto, do ponto de vista físico, estamos interessados em uma família de funções que possuem certas propriedades de regularidade. Nós vamos concentrar nossa atenção apenas em funções de onda $\psi(\mathbf{r},t)$ que são definidas em todos os pontos, contínuas e infinitamente diferenciáveis (por exemplo, estabelecer que uma função é descontínua em um dado ponto não tem significado físico, desde que nenhum experimento nos permite acessar um fenômeno real em uma escala muito pequena (PRINCÍPIO DA INCERTEZA)). Podemos também nos restringir a funções de onda que têm um domínio limitado (o que torna certo que a partícula pode ser encontrada em uma região finita do espaço, por exemplo dentro do laboratório).

Chamaremos então de $\mathfrak{S}$ o conjunto composto por funções de onda pertencentes a L^2 , mas que sejam “suficientemente regulares” ($\mathfrak{S}$ é um subespaço de L^2).

1.3.2 – Estrutura do Espaço Vetorial $\mathfrak{S}$ das funções de onda

1.3.2.1 – Produto Escalar

Definição: Para cada par de elementos de $\mathfrak{S}$, $\varphi(r)$ e $\psi(r)$, tomados nesta ordem, nós associamos um número complexo, denotado por (φ, ψ) , que por definição é igual a

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi^*(r) \psi(r) d^3r \quad (1.18)$$

(φ, ψ) é o *produto escalar de $\psi(r)$ por $\varphi(r)$* (esta integral converge se φ e ψ pertencem a $\mathfrak{S}$)

PROPRIEDADES:

$$(\varphi, \psi) = (\psi, \varphi)^* \quad (1.19)$$

$$(\varphi, \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2) = \lambda_1 (\varphi, \psi_1) + \lambda_2 (\varphi, \psi_2) \quad (1.20)$$

$$(\lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2, \psi) = \lambda_1^* (\varphi_1, \psi) + \lambda_2^* (\varphi_2, \psi) \quad (1.21)$$

O produto escalar é *linear* com respeito a uma segunda função do par e *antilinear* com respeito a primeira.

Se $(\varphi, \psi) = 0$, então φ e ψ são ditas *ortogonais*.

$$(\psi, \psi) = \int |\psi(r)|^2 d^3r \quad (1.22)$$

é um número *real e positivo*, o qual é zero *se e somente se* $\psi(r) \equiv 0$

$\sqrt{(\psi, \psi)}$ é chamado de *norma de $\psi(r)$* .

1.3.2.2 – OPERADOR LINEAR

Definição: Um operador linear A é, por definição, uma entidade matemática que associa a cada função $\psi(r) \in \mathfrak{S}$, outra função $\psi'(r)$, tal que:

$$\psi'(r) = A \psi(r) \quad (1.23)$$

$$A [\lambda_1 \psi_1(r) + \lambda_2 \psi_2(r)] = \lambda_1 A \psi_1(r) + \lambda_2 A \psi_2(r) \quad (1.24)$$

Como exemplo de operador linear podemos citar o operador paridade Π , cuja definição é:

$$\Pi \psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z) \quad (1.25)$$

• **PRODUTO DE OPERADORES**

Sejam A e B dois operadores lineares. O produto AB é definido por:

$$(AB) \psi(r) = A [B \psi(r)] \quad (1.26)$$

B atuando em $\psi(r)$, leva a $\varphi(r) = B \psi(r)$, sendo que A passa a atuar na nova função $\varphi(r)$.

Em geral, $AB \neq BA$. Nós podemos chamar de **comutador de A e B** o operador escrito como $[A, B]$ e definido por:

$$[A, B] = AB - BA \quad (1.27)$$

1.3.2.3 – BASE DISCRETA ORTONORMAL EM $\mathfrak{S} : \{u_i(r)\}$

Definição: Consideremos um conjunto de funções de $\mathfrak{S}$, rotuladas pelo índice discreto i ($i = 1, 2, 3, \dots$) $u_i(r) \in \mathfrak{S}$

- O conjunto $\{u_i(r)\}_-$ é **ortonormal** se:

$$(u_i, u_j) = \int d^3r u_i^*(r) u_j(r) = \delta_{ij} \quad (1.28)$$

onde δ_{ij} é a *função delta de Kronecker*.

- $\{u_i(r)\}$ constitui uma base, então toda função $\psi(r) \in \mathfrak{S}$, pode ser expandida em uma única combinação de $u_i(r)$:

$$\psi(r) = \sum_i c_i u_i(r) \quad (1.29)$$

- A componente de uma função de onda nesta base é dada pelo produto escalar da função com o elemento da base associado aquela componente, ou seja:

$$c_i = (u_i, \psi) = \int d^3r u_i^*(r) \psi(r) \quad (1.30)$$

1.3.3 – ESPAÇO DE ESTADOS - NOTAÇÃO DE DIRAC

Consideremos a seguinte situação em R^3 : a posição de um ponto no espaço pode ser descrita por um conjunto de três números, os quais são as coordenadas com respeito ao um dado sistema de eixos definidos. Se mudarmos o sistema de eixos, outro conjunto de coordenadas passa a corresponder ao mesmo ponto. Contudo, o conceito geométrico de vetor e o cálculo vetorial, nos libertam da preocupação de mencionar um sistema de eixos específico.

Vamos usar um tratamento semelhante na mecânica Quântica: **cada estado quântico de uma partícula será caracterizado por um vetor de estado , pertencente a um espaço abstrato , ε_r , chamado de espaço de estados de um partícula.**

Vamos agora definir a notação e as regras de cálculo vetorial em ε_r .

1.3.3.1 – O VETOR “KET”

- *Notação*

Qualquer elemento, ou vetor, do espaço ε_r , é chamado de **ket** . É representado pelo símbolo “ $|\rangle$ ”. Por exemplo: $|\psi\rangle$

Como o conceito de função de onda nos é familiar, podemos definir o espaço ε_r dos estados da partícula pela associação com toda função $\psi(r)$ quadrado integrável, um vetor ket $|\psi\rangle$ de ε_r :

$$\psi(r) \in \mathfrak{T} \Leftrightarrow |\psi\rangle \in \varepsilon_r \quad (1.31)$$

1.3.3.2 – O VETOR “BRA”

- **Definição de espaço dual ε^***

Por definição, um **funcional linear** χ , é uma operação linear que associa um número complexo a todo ket $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle \in \varepsilon \xrightarrow{\chi} \text{número } \chi(|\psi\rangle)$$

$$\chi(\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1 \chi(|\psi_1\rangle) + \lambda_2 \chi(|\psi_2\rangle) \quad (1.32)$$

Pode ser mostrado que um conjunto de funcional linear definido nos kets $|\psi\rangle \in \varepsilon$, constitui um espaço vetorial, chamado de **espaço dual** de ε , e que será simbolizado por ε^* .

Qualquer elemento do espaço ε^* é chamado de **vetor bra**, ou simplesmente, um **bra**. É simbolizado por $\langle |$. Por exemplo, o bra $\langle \chi |$ designa o funcional linear χ . Logo, podemos usar a notação $\langle \chi | \psi \rangle$, para denotar o **número** obtido da atuação do funcional linear $\langle \chi |$ no ket $|\psi\rangle$:

$$\chi(|\psi\rangle) = \langle \chi | \psi \rangle \quad (1.33)$$

- **CORRESPONDÊNCIA ENTRE KETS E BRAS**

A existência de um produto escalar em ε nos possibilita mostrar que podemos associar, com todo ket $|\phi\rangle \in \varepsilon$, um elemento de ε^* , ou seja, um bra, que será representado por $\langle \phi |$.

O ket $|\phi\rangle$ nos possibilita definir um funcional linear, o qual associa (linearmente), com cada ket $|\psi\rangle \in \varepsilon$, um número complexo que é igual ao produto escalar $(|\phi\rangle, |\psi\rangle)$ de $|\psi\rangle$ por $|\phi\rangle$.

Seja $\langle \phi |$ um funcional linear; portanto podemos definir a relação:

$$\langle \phi | \psi \rangle = (|\phi\rangle, |\psi\rangle) \quad (1.34)$$

No espaço ε , o produto escalar é antilinear com respeito ao primeiro vetor. Na notação (1.34), podemos expressar como segue:

$$(\lambda_1 |\phi_1\rangle + \lambda_2 |\phi_2\rangle, |\psi\rangle) = \lambda_1^* (|\phi_1\rangle, |\psi\rangle) + \lambda_2^* (|\phi_2\rangle, |\psi\rangle)$$

$$\begin{aligned}
&= \lambda_1^* \langle \varphi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \varphi_2 | \psi \rangle \\
&= (\lambda_1^* \langle \varphi_1 | + \lambda_2^* \langle \varphi_2 |) | \psi \rangle
\end{aligned} \tag{1.35}$$

De (1.35) percebemos que a relação entre o bra e o ket associado é dada por:

$$\lambda_1 | \varphi_1 \rangle + \lambda_2 | \varphi_2 \rangle \Rightarrow \lambda_1^* \langle \varphi_1 | + \lambda_2^* \langle \varphi_2 | \tag{1.36}$$

- **Produto escalar na notação de Dirac**

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^* \tag{1.36}$$

$$\langle \varphi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \varphi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \varphi | \psi_2 \rangle \tag{1.37}$$

$$\langle \lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2 | \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \varphi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \varphi_2 | \psi \rangle \tag{1.38}$$

$$\langle \psi | \psi \rangle \text{ real, positivo; zero se e somente se } | \psi \rangle = 0 \tag{1.39}$$

1.3.3.3 – OPERADOR LINEAR

Definição: Um operador linear A é, por definição, uma entidade matemática que associa a cada ket $| \psi \rangle \in \mathcal{E}$, outro ket $| \psi' \rangle$, tal que:

$$| \psi' \rangle = A | \psi \rangle \tag{1.40}$$

$$A [\lambda_1 | \psi_1 \rangle + \lambda_2 | \psi_2 \rangle] = \lambda_1 A | \psi_1 \rangle + \lambda_2 A | \psi_2 \rangle \tag{1.41}$$

O produto de dois operadores A e B , representado por AB , é dado por

$$(AB) | \psi \rangle = A (B | \psi \rangle) \tag{1.42}$$

Primeiro B atua em $| \psi \rangle$, levando ao ket $(B | \psi \rangle)$; então A atua no ket $(B | \psi \rangle)$. Em geral, $AB \neq BA$.

O comutador $[A, B]$ de A e B é, por definição:

$$[A, B] = AB - BA \tag{1.43}$$

Sejam $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ dois kets. Nós chamamos de *elemento de matriz* de A entre $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$, o produto escalar:

$$\langle \varphi | (A | \psi \rangle) \quad (1.44)$$

Conseqüentemente, é um *número*, o qual depende linearmente de $|\psi\rangle$ e antilinearmente de $|\varphi\rangle$.

- **Exemplo de um operador linear: PROJETOR**

Seja $|\psi\rangle$ um ket normalizado:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (1.45)$$

Consideremos um operador P_ψ definido como:

$$P_\psi = |\psi\rangle \langle \psi| \quad (1.46)$$

Sua atuação em um ket $|\varphi\rangle$:

$$P_\psi |\varphi\rangle = |\psi\rangle \langle \psi | \varphi \rangle \quad (1.47)$$

P_ψ atuando em um arbitrário ket $|\varphi\rangle$, dá um ket proporcional a $|\psi\rangle$. O coeficiente de proporcionalidade é o produto escalar de $|\varphi\rangle$ por $|\psi\rangle$.

O significado geométrico de P_ψ é claro: é o operador “*projeção ortogonal*” no ket $|\psi\rangle$.

Esta interpretação é confirmada pelo fato de $P_\psi^2 = P_\psi$ (projetar duas vezes sobre o mesmo vetor é o equivalente a projetar uma única vez). Verificando:

$$P_\psi^2 = P_\psi P_\psi = |\psi\rangle \langle \psi | \psi \rangle \langle \psi| \quad (1.48)$$

Nesta expressão, $\langle \psi | \psi \rangle$ é um número, o qual é igual a 1 (fórmula (1.45)). Portanto:

$$P_\psi^2 = |\psi\rangle \langle \psi| = P_\psi \quad (1.49)$$

- **O OPERADOR ADJUNTO “ $A^\dagger$ ” DO OPERADOR LINEAR “ A ”**

A correspondência entre os kets e os bras, estudada anteriormente, nos permite

associar com todo operador linear A , outro operador linear A^+ , chamado de operador adjunto (ou Hermitiano conjugado) de A .

Seja $|\psi\rangle$ um ket arbitrário de $\mathcal{E}$. O operador A associa a ele outro ket $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$.

Para cada ket $|\psi\rangle$ corresponde um bra $\langle\psi|$; da mesma maneira, $|\psi'\rangle$ corresponde a $\langle\psi'|$. Esta correspondência entre kets e bras, nos permite definir a ação de um operador A^+ associado com o bra $\langle\psi|$ correspondente ao ket $|\psi\rangle$; o bra $\langle\psi'|$ correspondente ao ket $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$ (ver esquema abaixo).

$$\begin{array}{ccc} & A & \\ |\psi\rangle & \longrightarrow & |\psi'\rangle = A|\psi\rangle \\ & & \\ \langle\psi| & \xrightarrow{A^+} & \langle\psi'| = A^+\langle\psi| \end{array}$$

A^+ é um operador linear, definido pela fórmula:

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle \Leftrightarrow \langle\psi'| = A^+\langle\psi| \quad (1.50)$$

De (1.50) é fácil deduzir outra importante relação satisfeita pelo operador A^+ .

Usando as propriedades do produto escalar, podemos escrever:

$$\langle\psi'| \phi\rangle = \langle\phi| \psi'\rangle^* \quad (1.51)$$

onde $|\phi\rangle$ é um ket arbitrário de $\mathcal{E}$. Usando a expressão (1.50) para $|\psi'\rangle$ e $\langle\psi'|$, nós obtemos:

$$\langle\psi| A^+ |\phi\rangle = \langle\phi| A |\psi\rangle^* \quad (1.52)$$

a relação é válida para todo $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$.

• OPERADOR HERMITIANO

Um operador é dito ser Hermitiano se é igual ao seu adjunto, ou seja ,

$$A = A^+ \quad (1.53)$$

1.3.3.4 – REPRESENTAÇÃO NO ESPAÇO DE ESTADOS

Escolher uma representação significa escolher uma base ortonormal no espaço de estados ε . Vetores e operadores são então representados nesta base por **números**: componentes para os vetores e elementos de matriz, para os operadores.

A escolha de uma base é, a princípio, arbitrária. Contudo, é óbvio que um problema particular a ser estudado, pode ser resolvido com cálculos mais simples dependendo da representação escolhida.

- **RELAÇÃO DE ORTONORMALIZAÇÃO**

Um conjunto de kets ($\{ | u_i \rangle \}$), é dito ser **ortonormal** , se os kets deste conjunto satisfazem a relação de ortonormalização:

$$\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij} \quad (1.54)$$

- **RELAÇÃO DE FECHAMENTO**

A relação

$$P = \sum_i | u_i \rangle \langle u_i | = \mathbb{1} \quad (1.55)$$

onde $\mathbb{1}$ é o operador identidade em ε , é chamada de **relação de fechamento**. Ela expressa o fato que o conjunto de kets ($\{ | u_i \rangle \}$) constitui uma base. Para todo ket $|\psi\rangle$ pertencente a ε , nós podemos escrever :

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \mathbb{1} |\psi\rangle = P |\psi\rangle = \sum_i | u_i \rangle \langle u_i | \psi \rangle \\ |\psi\rangle &= \sum_i c_i | u_i \rangle \end{aligned} \quad (1.56)$$

com

$$c_i = \langle u_i | \psi \rangle \quad (1.57)$$

Portanto, todo ket $|\psi\rangle$ tem uma única expansão na base $\{ | u_i \rangle \}$.

1.3.3.5 – EQUAÇÕES DE AUTOVALOR - OBSERVÁVEIS

- **AUTOVALOR E AUTOVETOR DE UM OPERADOR**

Definição: $|\psi\rangle$ é dito ser um autovetor (ou autoket) de um operador linear A , se:

$$A |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle \quad (1.58)$$

onde λ é um número complexo. Vamos agora apresentar algumas propriedades da equação (1.58), *a equação do autovalor do operador linear* . Em geral, esta equação possui soluções apenas quando λ assume certos valores, chamados **autovalores de A** . O conjunto de autovalores é chamado de **espectro** de A .

Podemos notar que , se $|\psi\rangle$ é um autovetor de A com autovalor λ , $\alpha |\psi\rangle$ (onde α é um número complexo arbitrário) é também um autovetor de A com o mesmo autovalor:

$$A (\alpha |\psi\rangle) = \alpha A |\psi\rangle = \alpha \lambda |\psi\rangle = \lambda (\alpha |\psi\rangle) \quad (1.59)$$

- **OBSERVÁVEL**

PROPRIEDADES DOS AUTOVALORES E AUTOVETORES DE UM OPERADOR HERMITIANO

Vamos apresentar dois importantes resultados que são válidos quando o operador é Hermitiano, ou seja:

$$A^+ = A \quad (1.60)$$

1. *Os autovalores de um operador Hermitiano são reais*
2. *Dois autovetores de um operador Hermitiano correspondentes a autovalores diferentes, são ortogonais entre si.*

(1.61)

DEFINIÇÃO DE UM OBSERVÁVEL

Vamos considerar um operador Hermitiano A . Por simplicidade, vamos

assumir que o conjunto de autovalores formam um espectro discreto $\{a_n ; n = 1, 2, 3, \dots\}$. Vamos chamar de $|\psi_n\rangle$ os autokets associados aos autovalores a_n .

$$A |\psi_n\rangle = a_n |\psi_n\rangle \quad (1.62)$$

Das propriedades (1.61), temos que :

$$\langle \psi_n | \psi_{n'} \rangle = \delta_{nn'} \quad (1.63)$$

Por definição, o operador Hermitiano A é um **observável**, se seu sistema ortonormal de autovetores **forma uma base** no espaço de estados. Isto pode ser expresso pela relação de fechamento:

$$\sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \mathbb{1} \quad (1.64)$$

- **Exemplo: O PROJETOR P_ψ**

Vamos mostrar que o projetor $P_\psi = |\psi\rangle \langle \psi|$ (com $\langle \psi | \psi \rangle = 1$) é um observável. P_ψ é um operador Hermitiano e seus autovalores são 1 e 0.

Consideremos um arbitrário ket $|\varphi\rangle$ no espaço de estados. Podemos escrever na forma:

$$|\varphi\rangle = P_\psi |\varphi\rangle + (\mathbb{1} - P_\psi) |\varphi\rangle \quad (1.65)$$

$P_\psi |\varphi\rangle$ é o autoket de P_ψ com autovalor 1. Agora, desde que $P_\psi^2 = P_\psi$:

$$P_\psi (P_\psi |\varphi\rangle) = P_\psi^2 |\varphi\rangle = P_\psi |\varphi\rangle \quad (1.66)$$

$(\mathbb{1} - P_\psi) |\varphi\rangle$ é também um autoket de P_ψ , mas com autovalor 0, como podemos ver de :

$$P_\psi (\mathbb{1} - P_\psi) |\varphi\rangle = (P_\psi - P_\psi^2) |\varphi\rangle = 0 \quad (1.67)$$

Portanto, todo ket $|\varphi\rangle$, pode ser expandido nos autokets de P_ψ . Logo P_ψ é um **observável**.

• **CONJUNTO DE OBSERVÁVEIS QUE COMUTAM**

Apresentaremos três importantes teoremas, cuja demonstração pode ser encontrada em [26]:

Teorema I

Se dois operadores A e B comutam, e se $|\psi\rangle$ é um autovetor de A , ($B|\psi\rangle$) é também um autovetor de A , com o mesmo autovalor.

Teorema II

Se dois observáveis A e B comutam, e se $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ são dois autovetores de A com diferentes autovalores, o elemento de matriz $\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle$ é zero.

Teorema III (FUNDAMENTAL)

Se dois observáveis A e B comutam, é sempre possível construir uma base ortonormal no espaço de estados com autovetores comuns a A e B .

(1.68)

C.S.C.O - CONJUNTO COMPLETO DE OBSERVÁVEIS QUE COMUTAM

Por definição, um conjunto de observáveis $A, B, C, \dots$ é chamado de um C.S.C.O (sigla em inglês de : *Complete Sets of Commuting Observables*) se :

1. todos os observáveis $A, B, C, \dots$ comutam aos pares;
2. especificando os autovalores de todos os operadores $A, B, C \dots$ determinamos um único (a menos de fator multiplicativo) autovetor comum.

Ou de maneira equivalente

Um conjunto de observáveis $A, B, C \dots$ é um C.S.C.O., se existe uma ÚNICA base ortonormal composta de autovetores comuns a todos eles.

(1.69)

OBSERVAÇÃO: Para um dado sistema físico, existem vários C.S.C.Os.

1.3.3.6- AS REPRESENTAÇÕES $\{ | \mathbf{r} \rangle \}$ e $\{ | \mathbf{p} \rangle \}$

Definição: Sejam duas particulares “bases” de $\mathfrak{S}$: $\{ \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) \}$ e $\{ \psi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) \}$. Elas não são compostas de funções pertencentes a $\mathfrak{S}$:

$$\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \quad (1.70)$$

$$\psi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}} \quad (1.71)$$

contudo, toda função quadrado integrável pode ser expandida em uma ou outra desta “bases”.

Como fizemos anteriormente, vamos associar a cada uma destas bases um ket do espaço de estados:

$$\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) \Leftrightarrow | \mathbf{r}_0 \rangle \quad (1.72)$$

$$\psi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) \Leftrightarrow | \mathbf{p}_0 \rangle \quad (1.73)$$

Usando as bases $\{ \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) \}$ e $\{ \psi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) \}$ de $\mathfrak{S}$, nós podemos definir em $\mathfrak{E}_{\mathbf{r}}$ duas representações : $\{ | \mathbf{r}_0 \rangle \}$ e $\{ | \mathbf{p}_0 \rangle \}$. A base de vetores da primeira representação é caracterizada por três “índices contínuos” x_0, y_0 e z_0 , os quais são coordenadas de um ponto no espaço tridimensional; para a segunda representação, os três índices são também componentes de um vetor ordinário.

• **RELAÇÃO DE ORTONORMALIZAÇÃO E FECHAMENTO**

Vamos calcular $\langle \mathbf{r}_0 | \mathbf{r}'_0 \rangle$. Usando a definição de produto escalar de $\mathfrak{E}_{\mathbf{r}}$:

$$\langle \mathbf{r}_0 | \mathbf{r}'_0 \rangle = \int d^3r \xi_{\mathbf{r}_0}^*(\mathbf{r}) \xi_{\mathbf{r}'_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}'_0) \quad (1.74)$$

(onde $\delta(\mathbf{r}_o - \mathbf{r}_o') =$ função delta de Dirac) Da mesma maneira :

$$\langle \mathbf{p}_o | \mathbf{p}_o' \rangle = \int d^3r \, v_{\mathbf{p}_o}^*(\mathbf{r}) v_{\mathbf{p}_o'}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{p}_o - \mathbf{p}_o') \quad (1.75)$$

O fato que os conjuntos de $|\mathbf{r}_o\rangle$ ou que $|\mathbf{p}_o\rangle$ constitui uma base em $\mathcal{E}_r$, pode ser expressando pela relação de fechamento em $\mathcal{E}_r$.

$$\langle \mathbf{r}_o | \mathbf{r}_o' \rangle = \delta(\mathbf{r}_o - \mathbf{r}_o') \quad (1.76)$$

$$\int d^3r_o |\mathbf{r}_o\rangle \langle \mathbf{r}_o| = \mathbb{1} \quad (1.77)$$

$$\langle \mathbf{p}_o | \mathbf{p}_o' \rangle = \delta(\mathbf{p}_o - \mathbf{p}_o') \quad (1.78)$$

$$\int d^3p_o |\mathbf{p}_o\rangle \langle \mathbf{p}_o| = \mathbb{1} \quad (1.79)$$

• COMPONENTES DE UM KET

Consideremos um arbitrário ket $|\psi\rangle$, correspondente a uma função de onda $\psi(\mathbf{r})$. As relações de fechamento (1.77) e (1.79), nos possibilitam expressar o ket das seguintes maneiras:

$$|\psi\rangle = \int d^3r_o |\mathbf{r}_o\rangle \langle \mathbf{r}_o | \psi \rangle \quad (1.80)$$

$$|\psi\rangle = \int d^3p_o |\mathbf{p}_o\rangle \langle \mathbf{p}_o | \psi \rangle \quad (1.81)$$

Os coeficientes $\langle \mathbf{r}_o | \psi \rangle$ e $\langle \mathbf{p}_o | \psi \rangle$, podem ser calculados usando as fórmulas:

$$\langle \mathbf{r}_o | \psi \rangle = \int d^3r \, \xi_{\mathbf{r}_o}^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (1.82)$$

$$\langle \mathbf{p}_o | \psi \rangle = \int d^3r \, v_{\mathbf{p}_o}^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (1.83)$$

Encontramos então:

$$\langle \mathbf{r}_o | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}_o) \quad (3.71)$$

$$\langle \mathbf{p}_o | \psi \rangle = \bar{\psi}(\mathbf{p}_o) \quad (3.72)$$

onde $\bar{\psi}(\mathbf{p})$ é a transformada de Fourier de $\psi(\mathbf{r})$.

O valor $\psi(r_o)$ da função de onda no ponto r_o é, portanto, a componente do ket $|\psi\rangle$ no vetor da base $|r_o\rangle$ na representação $\{|r_o\rangle\}$. A “função de onda no espaço dos momentos” $\bar{\psi}(\mathbf{p})$, pode ser interpretada de maneira análoga.

Capítulo 2

Oscilador Harmônico Quântico

Neste capítulo estudaremos um sistema muito importante na física: *o oscilador harmônico unidimensional*.

Iniciaremos apresentando o modelo clássico, para em seguida discutirmos o caso quântico, utilizando o formalismo de Dirac.

2.1- Oscilador Harmônico Clássico

Consideremos uma partícula de massa m movimentando-se sob a ação de um potencial, cuja dependência com a posição x seja do tipo:

$$V(x) = \frac{k x^2}{2} \quad (2.1)$$

onde k é uma constante real positiva. A partícula será atraída para a posição $x = 0$ (o qual corresponde ao valor mínimo de $V(x)$, sendo portanto a posição de equilíbrio estável), por uma força restauradora:

$$F_x = -\frac{dV}{dx} = -k x \quad (2.2)$$

O movimento da partícula será regido pela equação dinâmica:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{dV}{dx} = -kx \quad (2.3)$$

A solução geral deste equação é da forma;

$$x = x_m \cos(\omega t - \varphi) \quad (2.4)$$

com $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ e as constantes de integração x_m e φ determinadas pelas condições iniciais do problema. A partícula oscilará senoidalmente em torno da posição $x = 0$, com amplitude x_m e frequência angular ω .

A energia cinética da partícula será:

$$T = \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 = \frac{p^2}{2m} \quad (2.5)$$

onde $p = m \frac{dx}{dt}$ é o momento linear da partícula. A energia total será :

$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (2.6)$$

Substituindo a solução (2.4), temos:

$$E = \frac{1}{2} m \omega^2 x_m^2 \quad (2.7)$$

Portanto o sistema é **conservativo** (a energia independe do tempo). Se fixarmos um valor de energia E , os limites clássicos do movimento podem ser determinados na figura 2.1, tomando-se a intersecção da parábola com a linha paralela ao eixo Ox de ordenada E . Nos pontos $x = \pm x_m$, a energia potencial é máxima e a energia cinética é nula, sendo que em $x = 0$ a energia potencial é nula e a cinética é máxima.

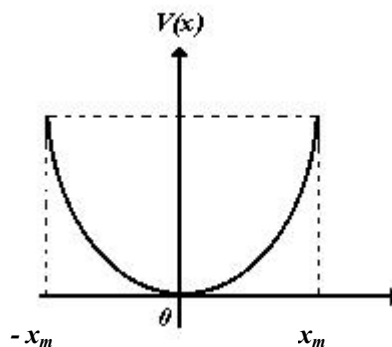


Figura 2.1 – A energia potencial $V(x)$ de um oscilador harmônico unidimensional.

2.1.1- Propriedades gerais do Hamiltoniano da mecânica quântica

Na mecânica quântica as quantidades clássicas x e p são substituídas pelos operadores observáveis X e P , os quais satisfazem a relação de comutação :

$$[X, P] = i\hbar \quad (2.8)$$

onde $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ e h (constante de Planck) $\cong 6,62 \cdot 10^{-34}$ joule . segundo.

Então o operador Hamiltoniano do sistema dado por (2.6) tem a forma:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 \quad (2.9)$$

Como o Hamiltoniano independe do tempo (sistema conservativo), o estudo do oscilador harmônico quântico reduz-se a solução da equação de autovalor:

$$H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle, \quad (2.10)$$

que na representação das coordenadas $\{|x\rangle\}$, passa a ter a forma;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (2.11)$$

Na próxima seção, estudaremos a equação de autovalor dada por (2.10), utilizando a relação de comutação (2.8) e o Hamiltoniano (2.9).

2.2- Autovalores do Hamiltoniano

Inicialmente vamos introduzir uma notação que será útil no desenvolvimento do problema.

2.2.1- Os operadores $\hat{X}$ e $\hat{P}$

Como os observáveis X e P e as grandezas ω e $\hbar$ têm dimensões, respectivamente, de comprimento, momento, inverso do tempo e produto de energia

pelo tempo, podemos definir os operadores $\hat{X}$ e $\hat{P}$ de modo que sejam adimensionais, ou seja:

$$\begin{aligned}\hat{X} &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \\ \hat{P} &= \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} P\end{aligned}\quad (2.12)$$

A relação canônica de comutação (2.8) utilizando estes novos operadores, passa a ser:

$$\begin{aligned}[\hat{X}, \hat{P}] &= \hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X} = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X\right)\left(\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} P\right) - \left(\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} P\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X\right) = \\ &= \frac{1}{\hbar} (XP - PX) = \frac{1}{\hbar} [X, P] = \frac{1}{\hbar} i\hbar = i\end{aligned}\quad (2.13)$$

e o Hamiltoniano (2.9) pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}H &= \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 = \frac{1}{2m} (\sqrt{m\hbar\omega} \hat{P})^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \hat{X}\right)^2 = \\ H &= \hbar\omega \frac{1}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2) \\ \Rightarrow H &= \hbar\omega \hat{H}\end{aligned}\quad (2.14)$$

onde

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2) \quad (2.15)$$

Temos então uma “nova” equação de autovalores :

$$\hat{H} |\varphi_v^i\rangle = \varepsilon_v |\varphi_v^i\rangle, \quad (2.16)$$

onde o operador $\hat{H}$ e os autovalores ε_v são adimensionais. O índice v pode ser referente tanto a um conjunto discreto, como a um conjunto contínuo de autovetores, e o índice i serve para distinguir os autovetores degenerados, ou seja, aqueles com o mesmo autovalor ε_v .

1.3.2 - Os operadores $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ e $\hat{N}$

Como os operadores $\hat{X}$ e $\hat{P}$ não comutam, a soma $(\hat{X}^2 + \hat{P}^2)$ que aparece em (2.15) não pode ser colocada como o produto de termos lineares: $(\hat{X} + i\hat{P})(\hat{X} - i\hat{P})$. Contudo podemos introduzir novos operadores, $\hat{a}$ e $\hat{a}^\dagger$, que facilitaram a obtenção dos autovetores de $\hat{H}$. São eles:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P}) \quad (2.17)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} - i\hat{P}) \quad (2.18)$$

Utilizando (2.17) e (2.18) podemos escrever os operadores $\hat{X}$ e $\hat{P}$ como segue:

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad (2.19)$$

$$\hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad (2.20)$$

Os operadores $\hat{X}$ e $\hat{P}$ são hermitianos mas $\hat{a}^\dagger$ e $\hat{a}$ não o são (devido ao fator i). Contudo, eles são o adjunto um do outro.

O comutador de $\hat{a}^\dagger$ e $\hat{a}$ pode ser obtido utilizando (2.17), (2.18) e (2.13)

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \frac{1}{2} [\hat{X} + i\hat{P}, \hat{X} - i\hat{P}] = \frac{1}{2} \{(\hat{X} + i\hat{P})(\hat{X} - i\hat{P}) - (\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P})\} \\ [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \frac{1}{2} \{ \hat{X}^2 - i\hat{X}\hat{P} + i\hat{P}\hat{X} + \hat{P}^2 - \hat{X}^2 - i\hat{X}\hat{P} + i\hat{P}\hat{X} - \hat{P}^2 \} \\ [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \frac{1}{2} \{ -2i\hat{X}\hat{P} + 2i\hat{P}\hat{X} \} = \frac{i}{2} \{ [\hat{P}, \hat{X}] - [\hat{X}, \hat{P}] \} = \frac{i}{2} \{ -i - i \} \\ \therefore [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= 1 \end{aligned} \quad (2.21)$$

Esta relação é equivalente a relação canônica (2.8).

Vamos obter outras relações que serão úteis no desenvolvimento deste capítulo. Calculando $\hat{a}^\dagger \hat{a}$:

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{1}{2} (\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P}) = \frac{1}{2} (\hat{X}^2 + i\hat{X}\hat{P} - i\hat{P}\hat{X} + \hat{P}^2)$$

$$\begin{aligned}
 a^\dagger a &= \frac{1}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2 + i [\hat{X}, \hat{P}]) = \frac{1}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2 + i^2) \\
 \Rightarrow a^\dagger a &= \frac{1}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2 - 1)
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

Comparando com (2.15), temos que :

$$\hat{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2} = \frac{1}{2} (\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P}) + \frac{1}{2} \tag{2.23}$$

O termo adicional $\frac{1}{2}$ que aparece em (2.23) é devido ao fato de $\hat{X}$ e $\hat{P}$ não comutarem. Utilizando um procedimento análogo, podemos obter:

$$\hat{H} = a a^\dagger - \frac{1}{2} \tag{2.24}$$

Definindo o operador $\mathbf{N}$ como:

$$\mathbf{N} = a^\dagger a, \tag{2.25}$$

temos que $\mathbf{N}$ é hermitiano pois :

$$\mathbf{N}^\dagger = (a^\dagger a)^\dagger = a^\dagger (a^\dagger)^\dagger = a^\dagger a = \mathbf{N} \tag{2.26}$$

Podemos então reescrever (2.23) como:

$$\hat{H} = \mathbf{N} + \frac{1}{2} \tag{2.27}$$

desta forma, *os autovetores de $\hat{H}$ são autovetores de $\mathbf{N}$ e vice versa.*

Vamos agora calcular os comutadores de $\mathbf{N}$ com $a^\dagger$ e a :

$$\begin{aligned}
 [\mathbf{N}, a] &= [a^\dagger a, a] = a^\dagger [a, a] + [a^\dagger, a] a \\
 \Rightarrow [\mathbf{N}, a] &= -a
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

$$\begin{aligned}
 [\mathbf{N}, a^\dagger] &= [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger [a, a^\dagger] + [a^\dagger, a^\dagger] a \\
 \Rightarrow [\mathbf{N}, a^\dagger] &= a^\dagger
 \end{aligned} \tag{2.29}$$

Podemos agora reescrever a equação (2.16), lembrando que os autovetores de $\mathbf{N}$ são também de $\hat{\mathbf{H}}$:

$$\hat{\mathbf{H}} | \varphi_v^i \rangle = \left(\mathbf{N} + \frac{1}{2} \right) | \varphi_v^i \rangle = \left(v + \frac{1}{2} \right) | \varphi_v^i \rangle \quad (2.30)$$

onde v são os autovalores de $\mathbf{N}$ associados aos autovetores $| \varphi_v^i \rangle$. Multiplicando ambos os lados de (2.30) por $\hbar \omega$ e utilizando (2.14) , vem:

$$\begin{aligned} \hbar \omega \hat{\mathbf{H}} | \varphi_v^i \rangle &= \left(v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega | \varphi_v^i \rangle \\ \mathbf{H} | \varphi_v^i \rangle &= \left(v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega | \varphi_v^i \rangle \end{aligned} \quad (2.31)$$

Notamos então, que os autovetores de $\mathbf{N}$ são também de $\mathbf{H}$ com autovalores $E_v = \left(v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$. A partir de agora, buscaremos a solução da equação de autovalor do operador $\mathbf{N}$, utilizando a relação canônica de comutação (2.21), a qual é equivalente à relação (2.8) e os comutadores (2.28) e (2.29).

2.2.2- Determinação do espectro

LEMA I (Propriedade dos autovalores de $\mathbf{N}$)

Os autovalores v do operador $\mathbf{N}$ são positivos ou zero.

PROVA:

Consideremos um arbitrário autovetor $| \varphi_v^i \rangle$ de $\mathbf{N}$. O quadrado da norma de um vetor $\mathbf{a} | \varphi_v^i \rangle$ é positivo ou zero.

$$\| \mathbf{a} | \varphi_v^i \rangle \|^2 = \langle \varphi_v^i | \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} | \varphi_v^i \rangle \geq 0 \quad (2.32)$$

Vamos usar a definição (2.25) de $\mathbf{N}$:

$$\langle \varphi_v^i | \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} | \varphi_v^i \rangle = \langle \varphi_v^i | \mathbf{N} | \varphi_v^i \rangle = v \langle \varphi_v^i | \varphi_v^i \rangle \quad (2.33)$$

Como $\langle \varphi_v^i | \varphi_v^i \rangle \geq 0$, a comparação de (2.32) e (2.33) mostra que:

$$v \geq 0 \quad (2.34)$$

LEMA II (Propriedades do vetor $a|\varphi_v^i\rangle$)

Seja $|\varphi_v^i\rangle$ um autovetor não nulo de N com autovalor v .

(i) Se $v = 0$, o ket $a|\varphi_v^i\rangle$ é nulo

(ii) Se $v > 0$, o ket $a|\varphi_v^i\rangle$ é um autovetor não nulo de N com autovalor $(v - 1)$

PROVA:

(i) De acordo com (2.33), o quadrado da norma é zero se $v = 0$; mas a norma de vetor é zero se e somente se o vetor é nulo. Consequentemente, se $v = 0$ é um autovalor de N , todos os autovetores de $a|\varphi_0^i\rangle$ associados com este autovalor, satisfazem a relação:

$$a|\varphi_0^i\rangle = 0 \quad (2.35)$$

Vamos mostrar que a relação (2.35) é característica desses autovetores.

Consideremos um vetor $|\varphi\rangle$ que satisfaz :

$$a|\varphi\rangle = 0 \quad (2.36)$$

Multiplicando ambos os lados por $a^\dagger$, temos:

$$a^\dagger a|\varphi\rangle = N|\varphi\rangle = 0 \quad (2.37)$$

Qualquer vetor que satisfaz (2.36) é um autovetor de N com autovalor $v = 0$.

(ii) Vamos agora assumir $v \geq 0$. De acordo com (2.33), o vetor $a|\varphi_v^i\rangle$ é não nulo, um vez que o quadrado da norma não é igual a zero.

Vamos mostrar que $a|\varphi_v^i\rangle$ é um autovetor de N . Para tanto, vamos aplicar a relação (2.28) no vetor $|\varphi_v^i\rangle$:

$$\begin{aligned} [N, a]|\varphi_v^i\rangle &= -a|\varphi_v^i\rangle \\ N a|\varphi_v^i\rangle - a N|\varphi_v^i\rangle &= -a|\varphi_v^i\rangle \\ N a|\varphi_v^i\rangle &= a N|\varphi_v^i\rangle - a|\varphi_v^i\rangle \\ N a|\varphi_v^i\rangle &= v a|\varphi_v^i\rangle - a|\varphi_v^i\rangle \\ \Rightarrow N[a|\varphi_v^i\rangle] &= (v - 1)[a|\varphi_v^i\rangle] \end{aligned} \quad (2.38)$$

Logo $a|\varphi_v^i\rangle$ é um autovetor de N com autovalor igual a $(v - 1)$.

LEMA III (Propriedades do vetor $a^\dagger | \varphi_v^i >$)

(i) $a^\dagger | \varphi_v^i >$ é sempre não nulo.

(ii) $a^\dagger | \varphi_v^i >$ é um autovetor de N com autovalor $(v + 1)$

PROVA:

(i) É fácil calcular a norma do vetor $a^\dagger | \varphi_v^i >$, usando as fórmulas (2.21) e (2.25)

$$\begin{aligned} \| a^\dagger | \varphi_v^i > \|^2 &= \langle \varphi_v^i | a a^\dagger | \varphi_v^i > = \langle \varphi_v^i | (1 + a^\dagger a) | \varphi_v^i > \\ &= \langle \varphi_v^i | \varphi_v^i > + \langle \varphi_v^i | N | \varphi_v^i > = (v + 1) \langle \varphi_v^i | \varphi_v^i > \end{aligned} \quad (1.39)$$

De acordo com o Lema I $v \geq 0$, então o ket $a^\dagger | \varphi_v^i >$ tem sempre norma não nula e, conseqüentemente, é não nulo.

(ii) Vamos provar que o ket $a^\dagger | \varphi_v^i >$ é um autovetor de N fazendo um procedimento ao utilizado no Lema II. De (2.29), temos:

$$\begin{aligned} [N, a^\dagger] | \varphi_v^i > &= a^\dagger | \varphi_v^i > \\ N a^\dagger | \varphi_v^i > - a^\dagger N | \varphi_v^i > &= a^\dagger | \varphi_v^i > \\ N a^\dagger | \varphi_v^i > &= a^\dagger N | \varphi_v^i > + a^\dagger | \varphi_v^i > = v a^\dagger | \varphi_v^i > + a^\dagger | \varphi_v^i > \\ \Rightarrow N [a^\dagger | \varphi_v^i >] &= (v + 1) a^\dagger | \varphi_v^i > \end{aligned} \quad (2.40)$$

1.3.4 - O espectro de N é composto de inteiros não degenerados

Consideremos um autovalor v de N e um autovetor não nulo associado com este autovalor.

De acordo com o Lema I, $v \geq 0$. Vamos assumir que v é não inteiro. Mostraremos que esta hipótese viola o Lema I e que portanto, deve ser excluída. Se v é um não inteiro, é sempre achar um inteiro $n \geq 0$, tal que :

$$n < v < n + 1 \quad (2.41)$$

Vamos agora considerar uma série de vetores:

$$| \varphi_v^i >, a | \varphi_v^i >, \dots, a^n | \varphi_v^i > \quad (2.42)$$

De acordo com o Lema II, cada um dos vetores $a^p |\varphi_v^i\rangle$ desta série (com $0 \leq p \leq n$) é um autovetor não nulo de N com auto valor $(v - p)$ (figura 2.2). A prova é por interação : $|\varphi_v^i\rangle$ é não nulo por hipótese ; $a |\varphi_v^i\rangle$ é não nulo (uma vez que $v > 0$) e corresponde ao autovalor $(v - 1)$ de N ; ; $a^n |\varphi_v^i\rangle$ é obtido quando a atua em $a^{n-1} |\varphi_v^i\rangle$, um autovetor de N com o estritamente positivo autovalor $(v - (n-1))$, desde que $p \leq n$ (conforme (2.41)).

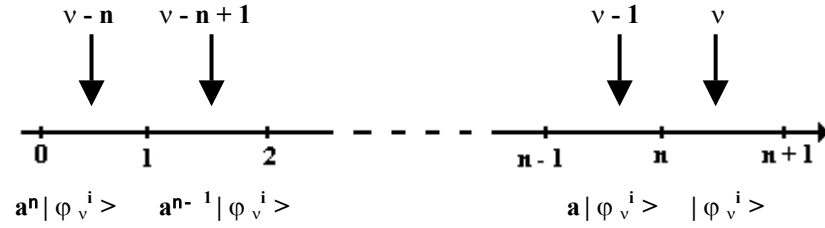


Figura 2.2 – Fazendo a atuar várias vezes no ket $|\varphi_v^i\rangle$, podemos obter autovetores de N com autovalores $(v - 1)$, $(v - 2)$, etc.

Façamos agora a atuar no ket $a^n |\varphi_v^i\rangle$. Desde que $(v - n) > 0$ de acordo com (2.41), a ação de a em $a^n |\varphi_v^i\rangle$ (um autovetor de N com autovalor $v - n > 0$) fornece um vetor não nulo (Lema II). Contudo, ainda de acordo com o Lema II, $a^{n+1} |\varphi_v^i\rangle$ é também um autovetor de N com autovalor $(v - (n+1))$, o qual é estritamente negativo de acordo com (2.41). Se v é um não inteiro, nós podemos construir um autovetor não nulo de N com um autovalor estritamente negativo. Desde que isto é impossível (Lema I), a hipótese de v não integral deve ser rejeitada.

Consideremos agora :

$$v = n, \quad \text{onde } n \text{ é um inteiro positivo ou zero} \quad (2.43)$$

Na série de vetores (2.42), $a^n |\varphi_n^i\rangle$ é um autovetor não nulo de N com autovalor zero. De acordo com o Lema II (ii), nós temos:

$$a^{n+1} |\varphi_n^i\rangle = 0 \quad (2.44)$$

A série obtida pela repetida ação do operador a em $|\varphi_n^i\rangle$ é portanto limitado quando n é inteiro. É impossível se obter um autovetor não nulo de N , ao qual corresponde um autovalor negativo.

Concluindo : v *pode ser apenas um inteiro não negativo.*

O Lema III pode ser usado para mostrar que o espectro de N inclui todos os inteiros maiores ou iguais a zero. Nós já construímos um autovetor de N com autovalor igual a zero ($a^n |\varphi_n^i\rangle > 0$). Basta agora fazer $(a^\dagger)^k$ atuar em tal vetor para obtermos um autovetor de N com autovalor k , onde k é um inteiro positivo arbitrário.

Se voltarmos a fórmula (2.31), vamos concluir que os autovalores de H são da forma:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (2.45)$$

Com $n = 0, 1, 2, \dots$. Portanto, na mecânica quântica, **a energia de um oscilador harmônico é quantizada** e não pode tomar qualquer valor arbitrário. Podemos notar que o menor valor (**estado fundamental**) tem energia não nula e sim, $\frac{\hbar\omega}{2}$.

1.3.5 - Interpretação dos operadores a e $a^\dagger$

Se nós iniciarmos com o autoestado $|\varphi_n^i\rangle$ de H correspondente ao autovalor $E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$, a aplicação do operador a fornece o autovetor com autovalor $E_{n-1} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega - \hbar \omega$, e aplicação do operador $a^\dagger$, fornece o autovetor com autovalor $E_{n+1} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega + \hbar \omega$.

Por esta razão, a é chamado de **operador destruição** e $a^\dagger$ de **operador criação**: sua ação sobre os autovetores de N faz um **quantum** de energia $\hbar \omega$ aparecer ou desaparecer.

1.3.6 - Degenerescência dos autovalores

(i) O estado fundamental é não degenerado

Os autoestados de H associados com o autovalor $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$, isto é, os autoestados de N associados com o autovalor $n = 0$, de acordo com o Lema II, devem todos satisfazer a equação:

$$a |\varphi_0^i\rangle = 0 \quad (2.46)$$

Para achar a degenerescência do nível E_0 , tudo que necessitamos é ver quantos kets linearmente independentes satisfazem (2.46)

Usando a definição (2.17) e as relações (2.12), nos podemos escrever (2.46) na forma:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} P \right) |\varphi_0^i\rangle = 0 \quad (2.47)$$

Na representação das coordenadas $\{ |x\rangle \}$, (2.47) fica:

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar} x + \frac{d}{dx} \right) \varphi_0^i(x) = 0 \quad (2.48)$$

onde :

$$\varphi_0^i(x) = \langle x | \varphi_0^i \rangle \quad (2.49)$$

Portanto nós devemos resolver uma equação diferencial de primeira ordem. A solução geral é:

$$\varphi_0^i(x) = c e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \quad (2.50)$$

onde c é uma constante de integração. As várias soluções de (2.48) são todas proporcionais entre si. Conseqüentemente, a menos de um fator multiplicativo, existe apenas um único ket $|\varphi_0\rangle$, o qual satisfaz (2.46); ou seja : ***o estado E_0 é não degenerado.***

(ii) Todos os estados são não degenerados.

Nós vimos que os estado fundamental é não degenerado. Vamos agora mostrar por recorrência que isto também ocorre para todos os outros estados.

Para tanto, vamos provar que se um nível $E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$, é não degenerado, o nível $E_{n+1} = (n + 1 + \frac{1}{2}) \hbar \omega$ também não é. Consideremos que existe , a menos de um fator constante , um vetor $|\varphi_n\rangle$ tal que:

$$N |\varphi_n\rangle = n |\varphi_n\rangle \quad (2.51)$$

Consideremos agora, o autovetor $|\varphi_{n+1}^i\rangle$ correspondente ao autovalor $(n + 1)$:

$$N |\varphi_{n+1}^i\rangle = (n + 1) |\varphi_{n+1}^i\rangle \quad (2.52)$$

Nós sabemos que o ket $a |\varphi_{n+1}^i\rangle$ é não nulo e que é um autovetor de N com autovalor n (conforme Lema II). Desde que o ket é não degenerado, por hipótese, existe um número c^i tal que:

$$a |\varphi_{n+1}^i\rangle = c^i |\varphi_n\rangle \quad (2.53)$$

Para invertermos esta equação, basta aplicarmos $a^\dagger$ de ambos os lados:

$$a^\dagger a |\varphi_{n+1}^i\rangle = c^i a^\dagger |\varphi_n\rangle \quad (2.54)$$

Usando (2.25) e (2.52), temos:

$$\begin{aligned} a^\dagger a |\varphi_{n+1}^i\rangle &= N |\varphi_{n+1}^i\rangle = (n+1) |\varphi_{n+1}^i\rangle = c^i a^\dagger |\varphi_n\rangle \\ \Rightarrow |\varphi_{n+1}^i\rangle &= \frac{c^i}{n+1} a^\dagger |\varphi_n\rangle \end{aligned} \quad (2.55)$$

Nós já sabemos que $a^\dagger |\varphi_n\rangle$ é um ket de N com autovalor $(n+1)$ e de (2.55), temos que os kets $|\varphi_{n+1}^i\rangle$ associados com os autovalores $(n+1)$, são proporcionais ao ket $a^\dagger |\varphi_n\rangle$. Portanto são proporcionais um ao outro; logo o autovalor $(n+1)$ é não degenerado.

Como foi visto anteriormente, se o autovalor com $n=0$ é não degenerado, então com $n=1$ também não será, nem com $n=2$, etc. Ou seja, ***todos os autovalores de N e portanto de H , são não degenerados.*** Então a partir de agora, podemos retirar o índice i dos autoestados de H e representá-los simplesmente como $|\varphi_n\rangle$, associados ao autovalor $E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$.

1.3.7 - Autoestados do Hamiltoniano

1.3.7.1 – A representação $\{|\varphi_n\rangle\}$

Nós podemos assumir que N e H são observáveis, ou seja, que seus autovetores constituem uma base no espaço de estados $\mathcal{E}_x$, o espaço de estados para uma partícula em um problema unidimensional. Como nenhum dos autovetores de N (ou H) são degenerados, eles constituem sozinhos um **CSCO** (sigla em inglês para: **conjunto completo de observáveis que comutam**) em $\mathcal{E}_x$.

(i) A base de vetores em termos de $|\varphi_0\rangle$

O vetor $|\varphi_0\rangle$ associado ao autovalor $n=0$ é um vetor de $\mathcal{E}_x$, que satisfaz:

$$a |\varphi_0\rangle = 0 \quad (2.56)$$

Ele é definido a menos de um fator constante. Se assumirmos que $|\varphi_0\rangle$ é normalizado, então esta indeterminação se reduz a um fator de fase da forma $e^{i\theta}$, onde θ é real.

De acordo com o Lema III, o ket $|\varphi_1\rangle$ é proporcional a $a^\dagger |\varphi_0\rangle$:

$$|\varphi_1\rangle = c_1 a^\dagger |\varphi_0\rangle \quad (2.57)$$

Nós podemos determinar c_1 impondo que $|\varphi_1\rangle$ seja normalizado e escolhendo o fator de fase de $|\varphi_1\rangle$ (relativo a $|\varphi_0\rangle$) tal que c_1 seja real e positivo. O quadrado da norma de $|\varphi_1\rangle$ de acordo com (2.57), é igual a :

$$\begin{aligned} \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle &= |c_1|^2 \langle \varphi_0 | a a^\dagger | \varphi_0 \rangle \\ &= |c_1|^2 \langle \varphi_0 | (a^\dagger a + 1) | \varphi_0 \rangle \end{aligned} \quad (2.58)$$

Como $|\varphi_0\rangle$ é um autoestado normalizado de $N = a^\dagger a$ com autovalor **zero**, nós encontramos:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle &= |c_1|^2 \langle \varphi_0 | (a^\dagger a + 1) | \varphi_0 \rangle = \\ &= |c_1|^2 \{ \langle \varphi_0 | a^\dagger a | \varphi_0 \rangle + \langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle \} \\ \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle &= |c_1|^2 \{ \langle \varphi_0 | N | \varphi_0 \rangle + 1 \} = |c_1|^2 = 1 \end{aligned} \quad (2.59)$$

Com a convenção do fator de fase, nós temos $c_1 = 1$ e, conseqüentemente:

$$|\varphi_1\rangle = a^\dagger |\varphi_0\rangle \quad (2.60)$$

Repetindo o procedimento para $|\varphi_2\rangle$:

$$|\varphi_2\rangle = c_2 a^\dagger |\varphi_1\rangle \quad (2.61)$$

Impondo que $|\varphi_2\rangle$ seja normalizado e escolhendo o fator de fase tal que c_2 seja real e positivo:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle &= |c_2|^2 \langle \varphi_1 | (a^\dagger a + 1) | \varphi_1 \rangle = \\ &= |c_2|^2 \{ \langle \varphi_1 | a^\dagger a | \varphi_1 \rangle + \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle \} \\ &= |c_2|^2 \{ \langle \varphi_1 | N | \varphi_1 \rangle + 1 \} = 2 |c_2|^2 = 1, \end{aligned} \quad (2.62)$$

ou seja (usando (2.60)) :

$$|\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger |\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger |\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger)^2 |\varphi_0\rangle \quad (2.63)$$

Generalizando o procedimento, podemos obter o vetor $|\varphi_n\rangle$ a partir de um vetor normalizado conhecido $|\varphi_{n-1}\rangle$, como segue:

$$|\varphi_n\rangle = c_n a^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle \quad (2.64)$$

Como $|\varphi_n\rangle$ é normalizado,

$$\langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = |c_n|^2 \langle \varphi_{n-1} | a a^\dagger | \varphi_{n-1} \rangle = n |c_n|^2 = 1 \quad (2.65)$$

Fazendo as mesmas convenções anteriores, vem:

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{n}} \quad (2.66)$$

Com sucessivas escolhas de fase, podemos obter $|\varphi_n\rangle$ de $|\varphi_0\rangle$:

$$\begin{aligned} |\varphi_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1}{\sqrt{n-1}} (a^\dagger)^2 |\varphi_{n-2}\rangle = \dots \\ &= \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1}{\sqrt{n-1}} \dots \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger)^n |\varphi_0\rangle \end{aligned} \quad (2.67)$$

Finalmente:

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |\varphi_0\rangle \quad (2.68)$$

(ii) Relações de Ortonormalização e de Fechamento

Como H é hermitiano, seus autovetores $|\varphi_n\rangle$ correspondentes a autovalores diferentes, são ortogonais. Uma vez que eles já estão normalizados, eles satisfazem a relação de ortonormalização:

$$\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \delta_{m,n} \quad (2.69)$$

Além disso, como H é um observável, o conjunto de seus autovetores $|\varphi_n\rangle$ formam uma base no espaço de estados $\mathcal{E}_X$. Isto pode ser representado pela relação de fechamento:

$$\sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| = 1 \quad (2.70)$$

(iii) Ação de vários operadores

Os observáveis X e P são combinações lineares dos operadores a e $a^\dagger$ (fórmulas (2.12), (2.19) e (2.20)). Conseqüentemente, todas as quantidades físicas podem ser expressas em termos de a e $a^\dagger$. Agora, a ação dos operadores a e $a^\dagger$ nos kets $|\varphi_n\rangle$ é especialmente simples. Em muitos casos, é interessante utilizar a representação $\{|\varphi_n\rangle\}$ para calcular os elementos de matriz e os valores médios de vários observáveis.

Com as convenções de fase introduzidas acima, a ação dos operadores $\mathbf{a}$ e $\mathbf{a}^\dagger$ nos vetores da base $\{|\varphi_n\rangle\}$ é dada por:

$$\mathbf{a}^\dagger |\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle \quad (2.71)$$

$$\mathbf{a} |\varphi_n\rangle = \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle \quad (2.72)$$

Para provar (2.71), basta substituir $\mathbf{n}$ por $(\mathbf{n} + 1)$ nas equações (2.64) e (2.66). Para provar (2.72), basta multiplicar à esquerda de ambos os lados de (2.64) pelo operador $\mathbf{a}$ e usar (2.66):

$$\begin{aligned} \mathbf{a} |\varphi_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}} \mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} (\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + 1) |\varphi_{n-1}\rangle \\ \mathbf{a} |\varphi_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}} \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} |\varphi_{n-1}\rangle + \frac{1}{\sqrt{n}} |\varphi_{n-1}\rangle \\ \mathbf{a} |\varphi_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}} (n-1) |\varphi_{n-1}\rangle + \frac{1}{\sqrt{n}} |\varphi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} n |\varphi_{n-1}\rangle \\ \Rightarrow \quad \mathbf{a} |\varphi_n\rangle &= \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle \end{aligned} \quad (2.73)$$

Os adjuntos de (2.71) e (2.72) são:

$$\langle \varphi_n | \mathbf{a} = \sqrt{n+1} \langle \varphi_{n+1} | \quad (2.74)$$

$$\langle \varphi_n | \mathbf{a}^\dagger = \sqrt{n} \langle \varphi_{n-1} | \quad (2.75)$$

Podemos notar que a ação do operador $\mathbf{a}$ aumenta ou diminui $\mathbf{n}$ de uma unidade, dependendo se sua ação é sobre um bra $\langle \varphi_n |$ ou sobre um ket $|\varphi_n\rangle$. O similar ocorre na ação do operador $\mathbf{a}^\dagger$.

Utilizando (2.71), (2.72), (2.12), (2.19) e (2.20), podemos obter as expressões dos kets $\mathbf{X}|\varphi_n\rangle$ e $\mathbf{P}|\varphi_n\rangle$:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}|\varphi_n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{a}^\dagger + \mathbf{a}) |\varphi_n\rangle \\ \mathbf{X}|\varphi_n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle + \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle] \end{aligned} \quad (2.76)$$

$$\mathbf{P}|\varphi_n\rangle = \sqrt{m\hbar\omega} \frac{i}{\sqrt{2}} (\mathbf{a}^\dagger - \mathbf{a}) |\varphi_n\rangle$$

$$P | \varphi_n \rangle = i \sqrt{\frac{m \hbar \omega}{2}} [\sqrt{n+1} | \varphi_{n+1} \rangle - \sqrt{n} | \varphi_{n-1} \rangle] \quad (2.77)$$

Os elementos de matriz dos operadores $a^\dagger$, a , X e P na base $\{ | \varphi_n \rangle \}$ são:

$$\langle \varphi_j | a | \varphi_n \rangle = \sqrt{n} \delta_{j, n-1} \quad (2.78)$$

$$\langle \varphi_j | a^\dagger | \varphi_n \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{j, n+1} \quad (2.79)$$

$$\langle \varphi_j | X | \varphi_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\sqrt{n+1} \delta_{j, n+1} + \sqrt{n} \delta_{j, n-1}] \quad (2.80)$$

$$\langle \varphi_j | P | \varphi_n \rangle = i \sqrt{\frac{m \hbar \omega}{2}} [\sqrt{n+1} \delta_{j, n+1} - \sqrt{n} \delta_{j, n-1}] \quad (2.81)$$

As matrizes que representam a e $a^\dagger$ são hermitiana conjugada uma da outra, como pode ser visto de suas expressão explícita:

$$(a) = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \sqrt{n} & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (2.82)$$

$$(a^\dagger) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \sqrt{n+1} & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (2.83)$$

As matrizes que representam X e P são ambas hermitianas : a matriz associada a X é , a menos de um fator constante, a soma de (2.82) e (2.83) , e a matriz associada a P é proporcional a diferença de (2.82) e (2.83) . Contudo, a presença do fator i em (2.77) restabelece sua hermiticidade.

1.3.8 - Os valores médios e o desvio quadrático médio dos operadores X e P no estado $| \varphi_n \rangle$

Como X e P não comutam com H , os autoestados $| \varphi_n \rangle$ de H , não são autoestados de X ou de P . Conseqüentemente, se o oscilador harmônico está

em um estado estacionário $|\varphi_n\rangle$, a medida do observável X e do observável P podem, *a priori*, fornecer qualquer resultado (uma vez que o espectro de X e P inclui todos os números reais). Vamos agora calcular o valor médio de X e de P em um dado estado estacionário e seu desvio quadrático médio ΔX e ΔP , o qual nos possibilitará verificar o **Princípio da Incerteza**.

Utilizando os resultados obtidos na seção 2.3.7.1 (iii), podemos desenvolver estes cálculos, com a ajuda dos operadores $a^\dagger$ e a . Podemos ver diretamente das relações (2.80) e (2.81), que X e P têm os elementos da diagonal nulos:

$$\begin{aligned}\langle \varphi_n | X | \varphi_n \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\sqrt{n+1} \delta_{n,n+1} + \sqrt{n} \delta_{n,n-1}] = 0 \\ \langle \varphi_n | P | \varphi_n \rangle &= i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} [\sqrt{n+1} \delta_{n,n+1} - \sqrt{n} \delta_{n,n-1}] = 0\end{aligned}\quad (2.84)$$

Para calcular o desvio quadrático médio ΔX e ΔP , nós precisamos calcular os valores médios de X^2 e de P^2 :

$$\begin{aligned}(\Delta X)^2 &= \langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle - (\langle \varphi_n | X | \varphi_n \rangle)^2 = \langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle \\ (\Delta P)^2 &= \langle \varphi_n | P^2 | \varphi_n \rangle - (\langle \varphi_n | P | \varphi_n \rangle)^2 = \langle \varphi_n | P^2 | \varphi_n \rangle\end{aligned}\quad (2.85)$$

Mas, de acordo com (2.12), (2.19) e (2.20), temos:

$$\begin{aligned}X^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega} (a^\dagger + a)(a^\dagger + a) \\ X^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega} ((a^\dagger)^2 + a a^\dagger + a^\dagger a + a^2)\end{aligned}\quad (2.86)$$

$$\begin{aligned}P^2 &= -\frac{m\hbar\omega}{2} (a^\dagger - a)(a^\dagger - a) \\ P^2 &= -\frac{m\hbar\omega}{2} ((a^\dagger)^2 - a a^\dagger - a^\dagger a + a^2)\end{aligned}\quad (2.87)$$

Os termos com a^2 e $(a^\dagger)^2$ não contribuem com elementos diagonais, pois $a^2|\varphi_n\rangle$ é proporcional a $|\varphi_{n-2}\rangle$ e $(a^\dagger)^2|\varphi_n\rangle$ é proporcional a $|\varphi_{n+2}\rangle$, os quais são ortogonais a $|\varphi_n\rangle$. Por outro lado:

$$\begin{aligned}\langle \varphi_n | (a^\dagger a + a a^\dagger) | \varphi_n \rangle &= \langle \varphi_n | (a^\dagger a + (a^\dagger a + 1)) | \varphi_n \rangle \\ &= \langle \varphi_n | (2a^\dagger a + 1) | \varphi_n \rangle = 2n + 1\end{aligned}\quad (2.88)$$

Conseqüentemente:

$$(\Delta X)^2 = \langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar}{m \omega} \quad (2.89)$$

$$(\Delta P)^2 = \langle \varphi_n | P^2 | \varphi_n \rangle = \left(n + \frac{1}{2} \right) m \hbar \omega \quad (2.90)$$

Substituindo os resultados acima em (2.85), vem:

$$\Delta X \cdot \Delta P = \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar}{m \omega} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) m \hbar \omega \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\Delta X \cdot \Delta P = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \quad (2.91)$$

Podemos notar que o produto $(\Delta X \cdot \Delta P)$ é maior ou igual a $\frac{\hbar}{2}$, obedecendo o **Princípio da Incerteza de Heisenberg**. Verificamos que a igualdade ocorre quando $n = 0$ ou seja, no estado fundamental.

Capítulo 3

Operador Densidade

Neste capítulo estudaremos como descrever o estado de sistemas sobre os quais temos uma informação incompleta (por exemplo, estados de fótons provenientes de uma fonte natural não polarizada) . Para conseguir isto, vamos introduzir uma poderosa e útil ferramenta matemática, o *operador densidade* , o qual facilita a aplicação simultânea dos postulados da mecânica quântica e os resultados dos cálculos de probabilidades.

3.1 – Estado Puro – Introdução do Operador Densidade

Quando o estado do sistema é perfeitamente conhecido, dizemos que o estado é puro. Consideremos um sistema cujo vetor em um dado instante t é:

$$| \psi(t) \rangle = \sum_n c_n(t) | u_n \rangle \quad (3.1)$$

onde $\{ | u_n \rangle \}$ forma uma base ortonormal no espaço de estados. Vamos assumir que $| \psi(t) \rangle$ é normalizado, ou seja

$$\sum_n | c_n |^2 = 1 \quad (3.2)$$

Se $\mathbf{A}$ é um observável, com elementos de matriz :

$$\langle u_n | \mathbf{A} | u_p \rangle = A_{np} \quad (3.3)$$

O valor médio de $\mathbf{A}$ no instante t é :

$$\langle \mathbf{A} \rangle(t) = \langle \psi(t) | \mathbf{A} | \psi(t) \rangle = \sum_{n,p} c_n^*(t) c_p(t) A_{np} \quad (3.4)$$

Finalmente, a evolução de $| \psi(t) \rangle$ é descrita pela equação de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle = H(t) | \psi(t) \rangle \quad (3.5)$$

onde $H(t)$ é o Hamiltoniano do sistema.

3.1.1 - Descrição via Operador Densidade

A relação (3.4) mostra que os coeficientes $c_n(t)$ aparece no valor médio através de expressões quadráticas do tipo $c_n^*(t) c_p(t)$. Estas são simplesmente os elementos de matriz do operador $| \psi(t) \rangle \langle \psi(t) |$, o projetor no ket $| \psi(t) \rangle$, como pode ser visto de (3.1) :

$$\langle u_p | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | u_n \rangle = c_n^*(t) c_p(t) \quad (3.6)$$

É natural definir o operador densidade $\rho(t)$ como:

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \quad (3.7)$$

O operador densidade é representado na base $\{ |u_n\rangle \}$ pela matriz chamada de *matriz densidade*, cujos elementos são:

$$\rho_{pn}(t) = \langle u_p | \rho(t) | u_n \rangle = c_n^*(t) c_p(t) \quad (3.8)$$

O operador densidade nos permite obter todos os resultados calculados a partir de $|\psi(t)\rangle$. De acordo com (3.8), a relação (3.2) indica que a soma dos elementos da diagonal da matriz densidade é igual a 1 :

$$\sum_n |c_n(t)|^2 = \sum_n \rho_{nn}(t) = \text{Tr } \rho(t) = 1 \quad (3.9)$$

Usando (3.3) e (3.8), a fórmula (3.4) passa a ser:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle(t) &= \sum_{n,p} \langle u_p | \rho(t) | u_n \rangle \langle u_n | A | u_p \rangle \\ &= \sum_p \langle u_p | \rho(t) A | u_p \rangle \\ &= \text{Tr} \{ \rho(t) A \} \end{aligned} \quad (3.10)$$

Finalmente, a evolução temporal do operador $\rho(t)$ pode ser deduzida da equação de Schrödinger:

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = \left(\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \right) \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle \left(\frac{d}{dt} \langle \psi(t)| \right)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{i\hbar} H(t) | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | + \frac{1}{-i\hbar} | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | H(t) \\
&= \frac{1}{i\hbar} [H(t) , \rho(t)]
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Portanto, em termos do operador densidade, a conservação de probabilidade pode expressada por:

$$\text{Tr } \rho(t) = 1 \tag{3.12}$$

O valor médio de um observável **A** é calculado usando a fórmula :

$$\langle A \rangle (t) = \text{Tr} \{ A \rho(t) \} = \text{Tr} \{ \rho(t) A \} \tag{3.13}$$

e a evolução temporal obedece a equação:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho(t) = [H(t) , \rho(t)] \tag{3.14}$$

Podemos também calcular de $\rho(t)$ a probabilidade $P(a_n)$ dos vários resultados a_n que podem ser obtidos da medida de um observável **A** em um instante t . $P(a_n)$ pode ser escrita como o valor médio do projetor **P_n** no autosubspaço associado com a_n :

$$P(a_n) = \langle \psi(t) | P_n | \psi(t) \rangle \tag{3.15}$$

Usando (3.13) obtemos:

$$P(a_n) = \text{Tr} \{ P_n \rho(t) \} \tag{3.16}$$

Da definição (3.7) é fácil ver que o operador densidade tem as seguintes propriedades :

$$\rho^\dagger(t) = \rho(t) \quad (3.17)$$

$$\rho^2(t) = \rho(t) \quad (3.18)$$

$$\text{Tr } \rho^2(t) = 1 \quad (3.19)$$

As relações (3.18) e (3.19) decorrentes do fato que $\rho(t)$ é um projetor, são válidas apenas para um estado puro. Mostraremos a seguir que são válidas para uma mistura estatística de estados.

3.2 - Mistura Estatística de Estados (caso não puro)

Consideremos um sistema que em um dado instante é descrito pelas probabilidades p_k associadas aos estados $|\psi_k\rangle$ e que satisfazem as condições:

$$0 \leq p_1, p_2, \dots, p_k, \dots \leq 1$$

$$\sum_k p_k = 1, \quad (3.20)$$

ou seja, não é possível associar-se um único vetor de estado ao sistema.

Sob estas condições, como calcular a probabilidade $P(a_n)$ de que uma medida do observável A forneça um resultado a_n ?

Seja :

$$P_k(a_n) = \langle \psi_k | P_n | \psi_k \rangle \quad (3.21)$$

a probabilidade de obtermos a_n se o vetor de estado for $|\psi_k\rangle$. Para obtermos a $P(a_n)$, nós devemos fazer a soma dos $P_k(a_n)$ com os respectivos pesos p_k :

$$P(a_n) = \sum_k p_k P_k(a_n) \quad (3.22)$$

De (3.16), temos:

$$P_k(a_n) = \text{Tr} \{ \rho_k P_n \} \quad (3.23)$$

onde :

$$\rho_k = |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \quad (3.24)$$

é o operador densidade correspondente ao estado $|\psi_k\rangle$. Substituindo (3.23) em (3.24), temos:

$$\begin{aligned} P(a_n) &= \sum_k p_k \text{Tr} \{ \rho_k P_n \} \\ &= \text{Tr} \left\{ \sum_k p_k \rho_k P_n \right\} \\ &= \text{Tr} \{ \rho P_n \}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

onde definimos :

$$\rho = \sum_k p_k \rho_k \quad (3.26)$$

como sendo o operador densidade.

Podemos agora obter propriedades gerais do o operador densidade. Como os coeficientes p_k são reais, ρ é um operador Hermitiano como cada um dos ρ_k . Calculando o traço de ρ :

$$\text{Tr} \rho = \sum_k p_k \text{Tr} \rho_k \quad . \quad (3.27)$$

Como o traço de ρ_k é sempre igual a 1 , segue :

$$\text{Tr } \rho = \sum_k p_k = 1 \quad . \quad (3.28)$$

Logo, a relação (3.12) é válida no caso geral. Podemos generalizar a fórmula (3.13) para misturas estatísticas:

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n P(a_n) = \text{Tr} \{ \rho \sum_n a_n P_n \} = \text{Tr} \{ \rho A \} . \quad (3.29)$$

Para calcular a evolução temporal do operador densidade, vamos admitir que o Hamiltoniano do sistema $H(t)$ é perfeitamente conhecido. Pode-se mostrar que se o sistema tem em um dado instante t_0 a probabilidade p_k de estar no estado $|\psi_k\rangle$, então no tempo subsequente t ele terá a mesma probabilidade p_k de estar no estado $|\psi_k(t)\rangle$ dado por :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_k(t)\rangle = H(t) |\psi_k(t)\rangle$$

$$|\psi_k(t_0)\rangle = |\psi_k\rangle \quad . \quad (3.30)$$

O operador densidade no instante t será :

$$\rho(t) = \sum_k p_k \rho_k(t) \quad (3.31)$$

com

$$\rho_k(t) = |\psi_k(t)\rangle \langle \psi_k(t)| \quad (3.32)$$

De acordo com (3.14), $\rho_k(t)$ obedece a equação de evolução:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_k(t) = [H(t), \rho_k(t)] \quad (3.33)$$

A linearidade de (3.31) e (3.35) com respeito a $\rho_k(t)$ implica que :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho(t) = [H(t), \rho(t)] \quad . \quad (3.34)$$

Podemos então generalizar para uma mistura estatística todas as equações obtidas para um estado puro, com exceção de (3.18) e (3.19). Em geral:

$$\rho^2 \neq \rho \quad (3.35)$$

$$\text{Tr } \rho^2 \leq 1 \quad . \quad (3.36)$$

Note que no caso em que o estado do sistema é puro, temos um único $p_k = 1$ e (3.36) reproduz (3.19). Assim a propriedade (3.36) pode ser usada para distinguir estados puros de estados de mistura estatística.

Da definição (3.26) temos que para qualquer ket $|u\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle u | \rho | u \rangle &= \sum_k p_k \langle u | \rho_k | u \rangle \\ &= \sum_k p_k |\langle u | \psi_k \rangle|^2 \end{aligned} \quad (3.37)$$

e conseqüentemente :

$$\langle u | \rho | u \rangle \geq 0 \quad . \quad (3.38)$$

Portanto ρ é um operador positivo.

3.3 – Descrição de parte de um sistema físico

Consideremos dois sistemas diferentes (1) e (2) e um sistema global (1) + (2), cujo espaço de estados é um produto tensorial:

$$\varepsilon = \varepsilon(1) \otimes \varepsilon(2) \quad (3.39)$$

Seja $\{ |u_n(1)\rangle \}$ uma base de $\varepsilon(1)$ e $\{ |v_p(2)\rangle \}$ uma base de $\varepsilon(2)$; os kets $|u_n(1)\rangle$ e $|v_p(2)\rangle$ formam uma base em ε .

O operador densidade ρ do sistema total é um operador que atua em ε . Vamos agora construir a partir de ρ um operador $\rho(1)$ (ou $\rho(2)$) que atua apenas em $\varepsilon(1)$ (ou $\varepsilon(2)$), o qual nos permite fazer previsões sobre as medidas feitas apenas no sistema (1) ou (2). Esta operação é chamada de traço parcial com respeito a (2) (ou (1)).

Vamos definir o operador $\rho(1)$ cujos elementos de matriz são:

$$\langle u_n(1) | \rho(1) | u_m(1) \rangle = \sum_p (\langle u_n(1) | \langle v_p(2) |) \rho (| u_m(1) \rangle | v_p(2) \rangle) \quad (3.40)$$

Por definição, $\rho(1)$ é obtido de ρ fazendo o traço parcial em (2):

$$\rho(1) = \text{Tr}_2 \rho \quad (3.41)$$

e

$$\rho(2) = \text{Tr}_1 \rho \quad (3.42)$$

tem os elementos de matriz :

$$\langle v_p(2) | \rho(2) | v_q(2) \rangle = \sum_n (\langle u_n(1) | \langle v_p(2) |) \rho (| u_n(1) \rangle | v_q(2) \rangle) \quad (3.43)$$

Do traço (total) de ρ :

$$\text{Tr } \rho = \sum_n \sum_p (\langle u_n(1) | \langle v_p(2) |) \rho (| u_n(1) \rangle | v_p(2) \rangle) \quad (3.44)$$

temos que:

$$\text{Tr } \rho = \text{Tr}_1 (\text{Tr}_2 \rho) = \text{Tr}_2 (\text{Tr}_1 \rho) \quad (45)$$

$\rho(1)$ e $\rho(2)$ são operadores (como ρ) Hermitianos cujo traço é igual a 1 e satisfazem as mesmas propriedades de um operador densidade.

Seja $A(1)$ um observável que atua em $\varepsilon(1)$ e $\tilde{A}(1) = A(1) \otimes \mathbb{1}(2)$, sua extensão em ε . Pode-se mostrar facilmente que :

$$\langle \tilde{A}(1) \rangle = \text{Tr} \{ \rho(1) A(1) \} \quad (3.46)$$

Vemos então que o traço parcial $\rho(1)$ nos possibilita calcular todos os valores médios $\langle \tilde{A}(1) \rangle$ como se o sistema (1) fosse isolado e $\rho(1)$ fosse o seu operador densidade. Logo $\rho(1)$ nos permite obter todas as probabilidades dos resultados de medidas efetuadas apenas no sistema (1).

3.4 - Pureza, Entropia Linear e Emaranhamento

Para sistemas de duas componentes, cujo estado total é puro,

$$\rho_{ab} = |\psi_{ab}\rangle \langle \psi_{ab}|, \quad (3.47)$$

a medida da pureza de uma das componentes é suficiente para medir a presença de emaranhamento. Para visualizar, considere um sistema de duas componentes em um estado total puro, representado pelo operador densidade (3.47). Quando o subsistema representado por ρ_a é puro? Isto é, em qual situação $\rho_a = |\psi_a\rangle \langle \psi_a|$?

Somente quando

$$|\psi_{ab}\rangle = |\psi_a\rangle \otimes |\psi_b\rangle \quad (3.48)$$

onde $|\psi_a\rangle$ e $|\psi_b\rangle$ representam o vetor de estado dos subsistemas. Para verificar, considere que $|\psi_{ab}\rangle$ é dado pela equação (3.48), então:

$$\rho_{ab} = |\psi_a\rangle \langle \psi_a| \otimes |\psi_b\rangle \langle \psi_b| \quad (3.49)$$

e, de acordo com as equações (3.41) e (3.42), ρ_a é necessariamente puro:

$$\rho_a = |\psi_a\rangle\langle\psi_a|, \quad (3.50)$$

onde usamos $\text{Tr}_b [|\psi_b\rangle\langle\psi_b|] = 1$. Portanto, se a matriz densidade do subsistema **a** não for a de um estado puro da forma (3.50), $|\psi_{ab}\rangle \neq |\psi_a\rangle \otimes |\psi_b\rangle$ e o sistema total é **emaranhado**. O estado de máximo emaranhamento é aquele em que ρ_a e ρ_b são maximamente mistos, isto é, aquele em que $\text{Tr} \rho_{a(b)}^2(t)$ são mínimos.

Entretanto em alguns casos, como no estudo de emaranhamento entre átomos e luz, é mais conveniente usar uma medida que cresça com o aumento do emaranhamento, por isso utiliza-se a diferença

$$s(t) = 1 - \text{Tr} \rho^2(t), \quad (3.51)$$

chamada **entropia linear**, limitada entre $0 \leq s(t) \leq 1$, que corresponde aos primeiros termos da expansão da entropia de von Neumann definida por

$$S(t) = -\text{Tr} [\rho(t) \ln \rho(t)], \quad (3.52)$$

que é uma generalização da entropia de Boltzmann da Mecânica Estatística Clássica.

É interessante notar que a entropia do sistema total independe do tempo $S_{ab}(t) = S_{ab}(0)$, enquanto que a entropia das partes,

$$S_{a(b)}(t) = -\text{Tr}_{a(b)} [\rho_{a(b)}(t) \ln \rho_{a(b)}(t)], \quad (3.53)$$

mantém a dependência temporal.

Assim como a entropia de von Neumann, a entropia linear total de um sistema de duas componentes, $s_{ab}(t)$, é limitada pela desigualdade de Araki - Lieb [37]:

$$|s_a(t) - s_b(t)| \leq s_{ab}(t) \leq s_a(t) + s_b(t), \quad (3.54)$$

cuja demonstração é encontrada em [38] e onde

$$s_{a(b)}(t) = 1 - \text{Tr} [\rho_{a(b)}^2(t)]. \quad (3.55)$$

Portanto, se o sistema total estiver em um estado puro, $s_{ab}(0) = s_{ab}(t) = 0$, necessariamente

$$s_a(t) = s_b(t). \quad (3.56)$$

A equação (3.56) corrobora a conveniência da entropia linear como medida de emaranhamento, pois o emaranhamento do sistema **a** com o sistema **b**, medido pela entropia $s_a(t)$ é igual ao emaranhamento do sistema **b** com o sistema **a**, medido pela entropia $s_b(t)$, visto que há apenas os dois subsistemas interagindo.

Capítulo 4

Divisor de feixes (sem absorção)

Neste capítulo estudaremos a ação de um divisor de feixes e obteremos a representação matricial do dispositivo a partir de princípios fundamentais. Por simplicidade, desprezaremos os efeitos de polarização e de imperfeição na colimação do feixe. Matematicamente, o divisor de feixes efetua uma transformação linear do vetor com amplitudes de entrada em amplitudes de saída.

4.1 - A matriz transformação do divisor de feixes

Na figura 4.1, representamos a geometria de um divisor de feixe. Os operadores de aniquilação de bósons, com a mesma frequência ω , estão relacionados por (são sempre quatro amplitudes pois na mecânica quântica existe o estado de vácuo $|0\rangle$)

$$\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

onde os operadores de entrada e saída da porta 1 são , respectivamente, **a** e **c** e os operadores de entrada e saída da porta 2 são, respectivamente, **b** e **d**. Estes operadores pertencem ao espaço de Hilbert.

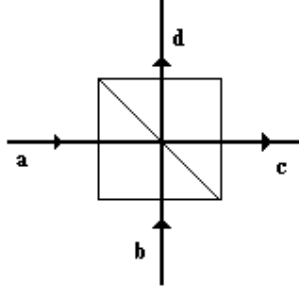


FIG. 4.1 – Configuração da operação de um divisor de feixe.

A matriz de transformação $\mathbf{B}$ tem elementos B_{ij} , os quais em geral são números complexos, para permitir uma mudança de fase no dispositivo, ou seja,

$$B_{ij} = |B_{ij}| e^{i\phi_{ij}}, \quad i, j = 1, 2. \quad (4.2)$$

As relações canônicas de comutação dos operadores de saída são (eq. (2.21)):

$$[c, c^\dagger] = [d, d^\dagger] = 1 \quad (4.3)$$

as quais levam as condições

$$|B_{11}|^2 + |B_{12}|^2 = 1 \quad (4.4a)$$

$$|B_{21}|^2 + |B_{22}|^2 = 1 \quad (4.4b)$$

$$B_{11} B_{21}^* + B_{12} B_{22}^* = 0 \quad (4.4c)$$

As equações (4.4a) e (4.4b) estão acopladas via equação (4.4c). Isto pode ser visto na decomposição da última em condições separadas de magnitude e fase:

$$|B_{11}| |B_{21}| = |B_{12}| |B_{22}| \quad (4.4d)$$

$$\phi_{11} - \phi_{12} = \phi_{21} - \phi_{22} \pm \pi \quad (4.4e)$$

Combinando as equações (4.4d) com as equações (4.4a) e (4.4b) e reescrevendo os resultados em termos da “transmitância” ($\mathbf{T}$) e “reflectância” ($\mathbf{R}$), tal que $\mathbf{R} = (1 - \mathbf{T})$, temos:

$$|B_{11}|^2 = |B_{12}|^2 = T \equiv \cos^2\theta \quad (4.5a)$$

$$|B_{21}|^2 = |B_{22}|^2 = R \equiv \sin^2\theta \quad (4.5b)$$

Todas as magnitudes são governadas pelo parâmetro angular

$$\theta = \arccos (T^{1/2}) , \quad 0 \leq \theta \leq \pi/2 \quad (4.5c)$$

Combinando a equação (4.4e) com a redefinição de fase conveniente,

$$\phi_T \equiv \frac{1}{2} (\phi_{11} - \phi_{22}) \quad (4.6a)$$

$$\phi_R \equiv \frac{1}{2} (\phi_{12} - \phi_{21} \pm \pi) \quad (4.6b)$$

$$\phi_0 \equiv \frac{1}{2} (\phi_{11} + \phi_{22}), \quad (4.6c)$$

nos permite escrever a matriz geral do divisor de feixe como:

$$\mathbf{B} = e^{i\phi_0} \begin{pmatrix} \cos \theta e^{i\phi_T} & \sin \theta e^{i\phi_R} \\ -\sin \theta e^{-i\phi_R} & \cos \theta e^{-i\phi_T} \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

cujo determinante é:

$$\det(\mathbf{B}) = e^{i2\phi_0}, \quad (4.8)$$

tal que a transformação é unitária, como se deveria esperar da conservação das relações canônicas de comutação de bósons. O número de fótons (e, portanto a energia) é conservado de acordo com a equação de operadores

$$N_1 + N_2 = n_1 + n_2 \quad (4.9a)$$

onde os operadores do número de saída e entrada são definidos como

$$N_1 = c^\dagger c , \quad N_2 = d^\dagger d , \quad n_1 = a^\dagger a , \quad n_2 = b^\dagger b , \quad (4.9b)$$

respectivamente. Desta forma o divisor de feixes está representado como um elemento ótico sem absorção.

É claro que somente a conservação de energia não é suficiente para determinar a ação completa do divisor de feixes. É necessário que as três fases independentes na equação (4.6) , bem como o parâmetro de transmissão na equação (4.5) , seja especificado. Isto justifica a diversidade de transformações de divisores

de feixes que aparecem na literatura; contudo, todas elas pertencem ao grupo de matrizes unitárias de segunda ordem $U(2)$.

Por outro lado, se impormos o vínculo adicional:

$$\phi_0 = 0 \quad (4.10)$$

Nós iremos restringir nossa transformação ao subgrupo unimodular $SU(2)$, como discutido por Yurke *et al* [29]. A representação deste subgrupo resulta quando o divisor de feixes não provoca uma mudança de fase nos campos de entrada,

$$\phi_T = \phi_R = 0 \quad (4.11a)$$

Isto revela a ação fundamental de rotação promovida pelo dispositivo,

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (4.11b)$$

4.1.2 - Conexão com o momento angular

Ainda que os resultados principais do divisor de feixe possam ser obtidos diretamente da matriz unitária bidimensional, conforme descrito acima, um entendimento complementar do processo pode ser obtido em uma visão tridimensional. A redução da transformação do divisor de feixes para uma matriz com três graus de liberdade é uma conexão fundamental, desde que os mesmos números de parâmetros são necessários para descrever a orientação de um corpo sólido clássico no espaço.

Com o objetivo de realizar a correspondência com o problema quântico, vamos usar as relações de Schwinger para descrever o oscilador harmônico bidimensional em termos do momento angular de um sistema normalizado a $\hbar$ [30].

$$L_1 = \frac{1}{2} (a^\dagger b + b^\dagger a) \quad (4.12a)$$

$$L_2 = \frac{1}{2i} (a^\dagger b - b^\dagger a) \quad (4.12b)$$

$$L_3 = \frac{1}{2} (a^\dagger a - b^\dagger b) \quad (4.12c)$$

Como pode ser verificado, elas satisfazem as relações canônicas:

$$[L_i, L_j] = i \varepsilon_{ijk} L_k \quad (4.13)$$

O tensor de Levi-Civita ε_{ijk} é igual a $+1$ e -1 para permutações pares e ímpares dos índices, respectivamente, e zero para as outras permutações.

Com a associação acima, nota-se que obtemos um álgebra idêntica a do momento angular. Assim podemos mapear o divisor de feixes como um problema de momento angular, o qual conhecemos a solução.

O quadrado e a projeção do momento angular estão relacionados com os operadores do número de bósons via

$$L^2 \equiv \sum_{j=1}^3 L_j^2 = l(l+1); \quad L_3 \equiv m \quad (4.14a)$$

$$l \equiv \frac{1}{2}(n_1 + n_2); \quad m \equiv \frac{1}{2}(n_1 - n_2) \quad (4.14b)$$

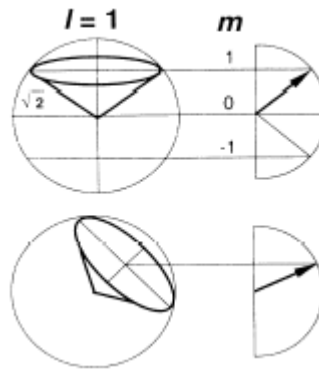


Figura 4.2 – O vetor momento angular é representado na mecânica quântica por um cone, com sua projeção no eixo polar bem definida, mas com as duas componentes ortogonais incertas. Para uma energia fixada $l = 0,5 (n_1 + n_2)$, existem $(2l + 1)$ valores possíveis de componente polar $m = 0,5 (n_1 - n_2)$ de momento angular, indicado no diagrama pelos três possíveis valores de m para $l = 1$. O operador do divisor de feixes roda qualquer cone de entrada na esfera de Bloch de raio $[l(l+1)]^2$.

Desde que o valor esperado de l em um estado geral mede o número total médio de fótons nas portas de entrada, o confinamento do momento angular na esfera do paradigma de Schwinger é equivalente a conservação da energia média do sistema. A diferença do número médio de fótons, por outro lado, representa a

projeção média de entrada do momento angular. Para os números de estados nas portas de entrada, a desigualdade $-l \leq m \leq l$ assume a degenerescência das $2l + 1$ configurações de entrada quando o sistema contém $2l = n_1 + n_2$ fótons. Isto é mostrado na figura 4.2 para $l = 1$.

Vamos considerar a transformação do momento angular de Schwinger via um operador unitário $B(\Phi, \Theta, \Psi)$, obedecendo a operação:

$$L'_j = B(\Phi, \Theta, \Psi) L_j B^\dagger(\Phi, \Theta, \Psi), \quad j = 1, 2, 3. \quad (4.15a)$$

Isto faz o vetor rodar na esfera de momento angular para uma nova posição que depende dos três parâmetros (Φ, Θ, Ψ) . Os momentos angulares primos podem ser escritos na forma das equações (12),

$$L'_1 = \frac{1}{2} (c^\dagger d + d^\dagger c) \quad (4.15b)$$

$$L'_2 = \frac{1}{2i} (c^\dagger d - d^\dagger c) \quad (4.15c)$$

$$L'_3 = \frac{1}{2} (c^\dagger c - d^\dagger d) \quad (4.15d)$$

estabelecido que os novos operadores criação e destruição são obtidos de maneira similar :

$$c = B(\Phi, \Theta, \Psi) a B^\dagger(\Phi, \Theta, \Psi) \quad e \quad d = B(\Phi, \Theta, \Psi) b B^\dagger(\Phi, \Theta, \Psi) \quad (4.16)$$

O operador unitário $B(\Phi, \Theta, \Psi)$ preserva as relações de comutação das equações (4.13), mantendo desta forma as transformações canônicas dos operadores de destruição. Os campos de saída, os quais foram discutidos por Titulaer e Glauber [31], geram seu próprio conjunto de estados a partir do vácuo:

$$|N_1\rangle = \frac{1}{(N_1!)^{\frac{1}{2}}} (c^\dagger)^{N_1} |0\rangle \quad e \quad |N_2\rangle = \frac{1}{(N_2!)^{\frac{1}{2}}} (d^\dagger)^{N_2} |0\rangle \quad (4.17)$$

O operador transformação $B(\Phi, \Theta, \Psi)$ é suficiente para caracterizar o divisor de feixes. De acordo com a teoria do momento angular, este operador é apenas uma representação de um grupo de rotação em três dimensões ($SO(3)$, ou ortogonal especial)[32][33][34]

$$B(\Phi, \Theta, \Psi) = e^{-i\Phi L_3} e^{-i\Theta L_2} e^{-i\Psi L_3} \quad (4.18)$$

onde os parâmetros (Φ, Θ, Ψ) são os equivalentes na mecânica quântica dos clássicos ângulos de Euler. Cada operador exponencial do momento angular gera uma nova orientação espacial pelo implemento de rotação em torno do eixo correspondente ao seu índice. Por exemplo[29]:

$$e^{-i\Theta L_2} \begin{pmatrix} L_1 \\ L_2 \\ L_3 \end{pmatrix} e^{i\Theta L_2} = \begin{pmatrix} \cos \Theta & 0 & -\text{sen} \Theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \text{sen} \Theta & 0 & \cos \Theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_1 \\ L_2 \\ L_3 \end{pmatrix} \quad (4.19a)$$

$$e^{-i\Phi L_3} \begin{pmatrix} L_1 \\ L_2 \\ L_3 \end{pmatrix} e^{i\Phi L_3} = \begin{pmatrix} \cos \Phi & \text{sen} \Phi & 0 \\ -\text{sen} \Phi & \cos \Phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_1 \\ L_2 \\ L_3 \end{pmatrix} \quad (4.19b)$$

De acordo com o formalismo de Schwinger, isto implica que L_2 e L_3 transformam os operadores de bósons de entrada $\mathbf{a}$ e $\mathbf{b}$ como segue:

$$e^{-i\Theta L_2} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} e^{i\Theta L_2} = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\Theta}{2}) & \text{sen}(\frac{\Theta}{2}) \\ -\text{sen}(\frac{\Theta}{2}) & \cos(\frac{\Theta}{2}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (4.20a)$$

$$e^{-i\Phi L_3} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} e^{i\Phi L_3} = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\Phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\Phi}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (4.20b)$$

tal que os efeitos combinados da mudança de fase e rotação de $\mathbf{B}$ (Φ, Θ, Ψ) resultam em uma matriz SU(2)

$$B = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\Psi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\Psi}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\frac{\Theta}{2}) & \text{sen}(\frac{\Theta}{2}) \\ -\text{sen}(\frac{\Theta}{2}) & \cos(\frac{\Theta}{2}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\Phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\Phi}{2}} \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

$$= \begin{pmatrix} \cos(\frac{\Theta}{2}) e^{i[(\Psi+\Phi)/2]} & \text{sen}(\frac{\Theta}{2}) e^{i[(\Psi-\Phi)/2]} \\ -\text{sen}(\frac{\Theta}{2}) e^{-i[(\Psi-\Phi)/2]} & \cos(\frac{\Theta}{2}) e^{-i[(\Psi+\Phi)/2]} \end{pmatrix}$$

Uma comparação com a solução desejada representada pelas equações (4.7) e (4.10), fornece uma associação com os ângulos de Euler para os parâmetros do divisor de feixes:

$$\theta = \frac{1}{2}\Theta ; \quad \phi_r = \frac{1}{2}(\Psi + \Phi); \quad \phi_p = \frac{1}{2}(\Psi - \Phi) \quad (4.22)$$

Com a ajuda das equações (4.5c) e (4.18) , nós podemos obter o operador divisor de feixes geral SU(2)

$$B (\tau , \phi_\tau , \phi_p) = e^{-i(\phi_\tau - \phi_p)L_3} e^{-i2\arccos(\tau^{\frac{1}{2}})L_2} e^{-i(\phi_\tau + \phi_p)L_3} \quad (4.23)$$

Se nós considerarmos os operadores de criação e destruição de *quanta* de momento angular

$$L_\pm = L_1 \pm i L_2 = (a^\dagger b + b^\dagger a) \quad (4.24a)$$

Assim chamados porque eles aumentam e diminuem a projeção **m** do momento angular de uma unidade por estados com projeções bem definidas

$$L_\pm | l , m > = [l (l + 1) - m (m \pm 1)]^{\frac{1}{2}} | l , m \pm 1 > , \quad (4.24b)$$

nós podemos reescrever a equação (4.23) com as equações (4.19b) e (4.24a) como

$$B (\tau , \phi_\tau , \phi_p) = D^\dagger(\xi) e^{-i2\phi_\tau L_3} , \quad (4.25a)$$

onde

$$D^\dagger(\xi) \equiv e^{\xi L_+ - \xi^* L_-} , \quad \xi \equiv \arccos (\tau^{\frac{1}{2}}) e^{-i(\phi_\tau - \phi_p)} . \quad (4.25b)$$

Equação (4.25b) é o operador de “*two-mode mixing*” de Schumaker [35], o qual foi obtido no contexto do divisor de feixes por Prasad *et al* [36].

Capítulo 5

Emaranhamento no divisor de feixes

Neste capítulo, faremos um estudo comparativo entre as entropias de von Neumann e Tsallis como medida do grau de emaranhamento dos campos de saída de um divisor de feixes. Consideraremos o caso em que os estados dos campos de entrada são estados com um número definido de fótons (estados Fock)

Os resultados deste trabalho foram apresentados no XXVIII CNMAC – Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional - no Centro Universitário Senac – Campus Santo Amaro – SP [39].

5.1 - Ação do divisor de feixe

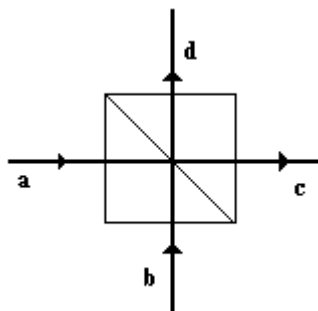


FIG. 5.1 – Configuração da operação de um divisor de feixe.

A figura 5.1 mostra esquematicamente arranjo do divisor de feixe. O campo de entrada descrito pelo operador a é superposto com outro campo de entrada b , em um divisor de feixe cujos coeficientes de reflexão e transmissão são, respectivamente, r e t (com $r^2 + t^2 = 1$). Os operadores aniquilação do campo de saída são:

$$c = B a B^\dagger \quad ; \quad d = B b B^\dagger \quad , \quad (5.1)$$

onde o operador representando a ação do divisor de feixe é [17]

$$B = \exp \left[\frac{\theta}{2} (a^\dagger b e^{i\phi} - a b^\dagger e^{-i\phi}) \right], \quad (5.2)$$

com os coeficientes de reflexão e transmissão identificados como sendo

$$t = \cos \frac{\theta}{2} \quad e \quad r = \sin \frac{\theta}{2} \quad (5.3)$$

e ϕ a diferença de fase entre os campos refletido e transmitido.

Considerando que os estados de entrada são dois estados de Fock independentes $|n_1 n_2\rangle = |n_1\rangle_a |n_2\rangle_b$, o estado de saída $|\psi\rangle$ será a superposição dos dois modos dos estados de Fock (o desenvolvimento das expressões abaixo estão apresentados no apêndice A), ou seja,

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= B |n_1 n_2\rangle = \sum_{N_1 N_2} \langle N_1 N_2 | B |n_1 n_2\rangle |N_1 N_2\rangle \\ |\psi\rangle &= B |n_1 n_2\rangle = \sum_{N_1 N_2} B_{n_1 n_2}^{N_1 N_2} |N_1 N_2\rangle \end{aligned} \quad (5.4)$$

onde

$$\begin{aligned} B_{n_1 n_2}^{N_1 N_2} &= \exp \{ -i\phi (n_1 - N_1) \} \times \sum_{k=0}^{n_1} \sum_{l=0}^{n_2} (-1)^{n_1-k} r^{n_1+n_2-k-l} t^{k+l} \times \\ &\quad \frac{\sqrt{n_1! n_2! N_1! N_2!}}{k!(n_1-k)! l!(n_2-l)!} \times \delta_{N_1, n_2+k-l} \delta_{N_2, n_1-k+l} \end{aligned} \quad (5.5)$$

onde δ é a função delta de Kronecker. Quando o número total de fótons de entrada é $N = n_1 + n_2$, o estado de saída é um estado emaranhado com dimensão $(N + 1)$.

5.2 – As entropias

A entropia de von Neumann $S(\rho_c)$ e a de Tsallis $S_q(\rho_c)$ para o operador densidade reduzido $\rho_c = \text{Tr}_d B |n_1 n_2\rangle \langle n_1 n_2| B^\dagger$ são, respectivamente:

$$S(\rho_c) = - \sum_{N_1 N_2} |B_{n_1 n_2}^{N_1 N_2}|^2 \ln |B_{n_1 n_2}^{N_1 N_2}|^2 \quad (5.6)$$

$$S_q(\rho_c) = \frac{1}{(q-1)} \left(1 - \sum_{N_1 N_2} |B_{n_1 n_2}^{N_1 N_2}|^{2q} \right) \quad (5.7)$$

A seguir, vamos analisar o comportamento de $S(\rho_c)$ e de $S_q(\rho_c)$ em função do índice entrópico q , o qual será variado no intervalo $[0; 1]$, pois neste a função é mais sensível [14] e capaz de detectar pequenas variações na correlação das variáveis.

1º caso: Estado coerente SU(2)

Quando N fótons são injetados em uma das entradas do divisor de feixe e o vácuo (ausência de fótons) é colocado na outra entrada, o estado de saída é conhecido como estado coerente SU(2) [13,20]. Na figura 5.2 apresentamos o caso em que $n_1 = 0$ e $n_2 = 10$ e na figura 5.3, o caso em que $n_1 = 20$ e $n_2 = 0$.

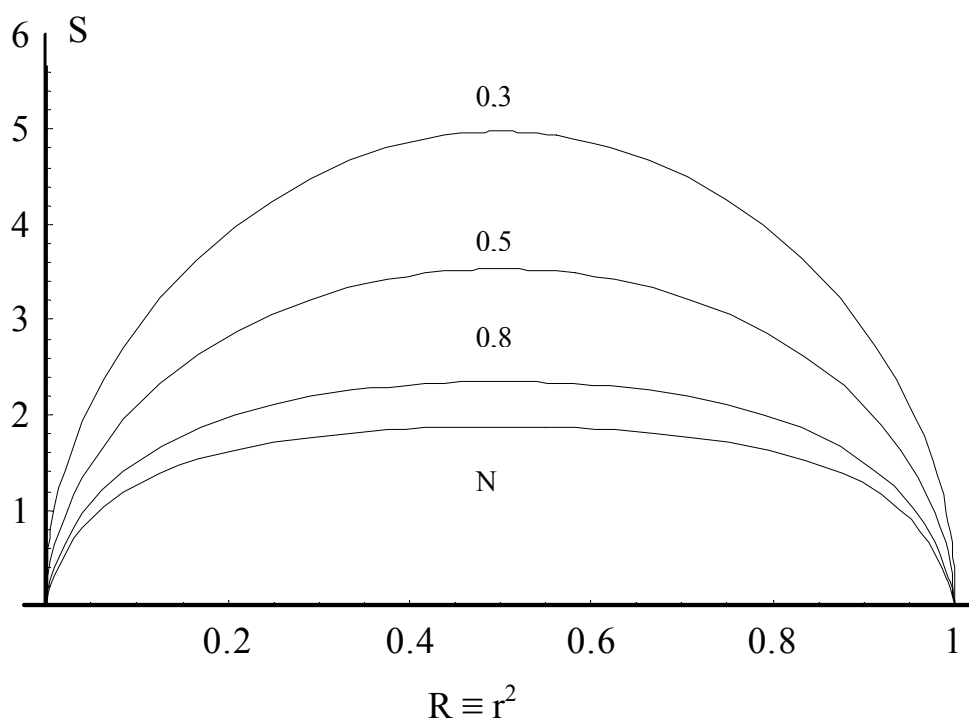


FIG. 5.2- A medida do emaranhamento (entropia) é apresentada em função do da amplitude de reflexão R , para a de von Neumann (N) e a de Tsallis ($q = 0,3; 0,5$ e $0,8$).

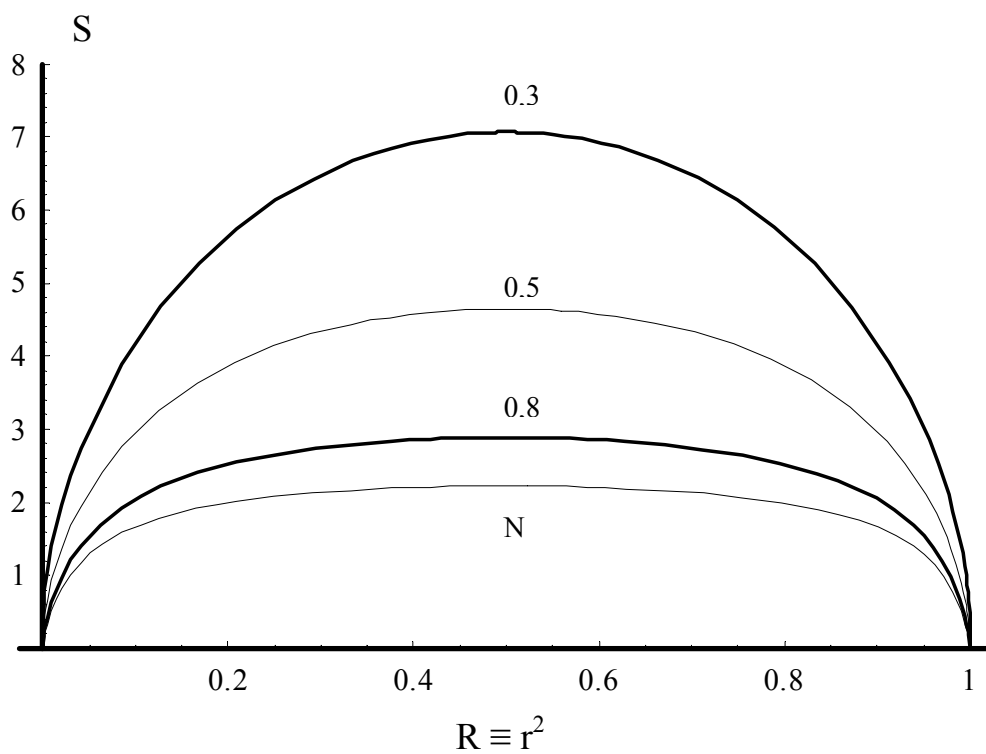


FIG. 5.3- A medida do emaranhamento (entropia) é apresentada em função do da amplitude de reflexão R , para a de von Neumann (N) e a de Tsallis ($q = 0,3; 0,5$ e $0,8$).

2º caso: Campos de entrada com o mesmo número de fótons

Na figura 5.4, apresentamos o caso em que foram colocados dois estados de Fock com o mesmo número de fótons ($n_1 = n_2 = 5$) nas entradas do divisor de feixe. Na figura 5.5 repetimos o procedimento para $n_1 = n_2 = 10$.

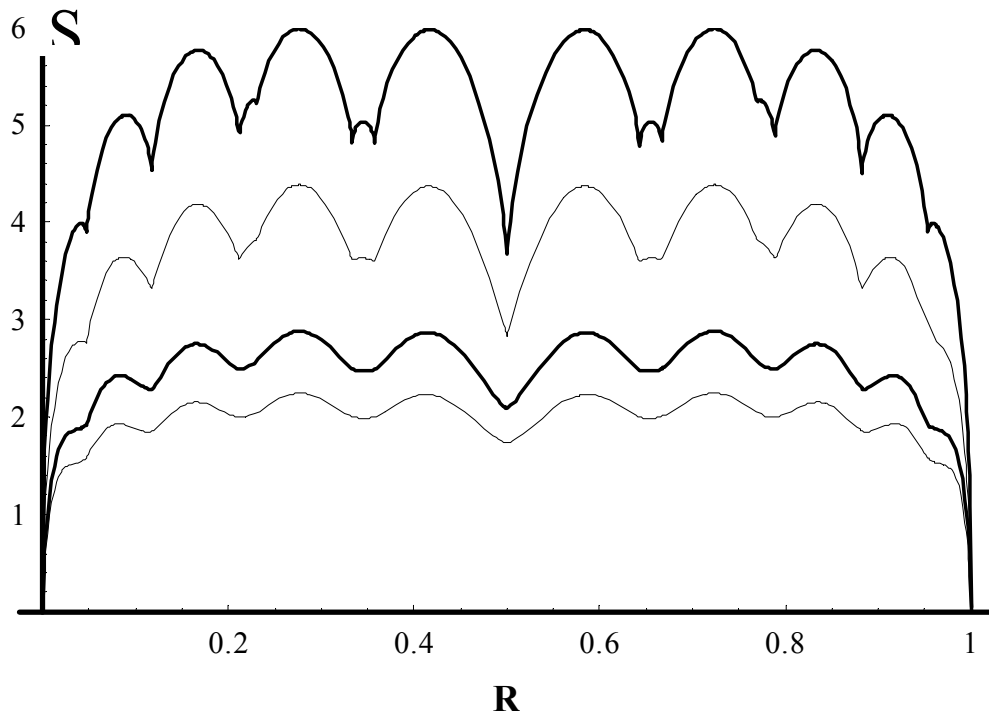


FIG. 5.4 - A medida do emaranhamento (entropia) é apresentada em função da amplitude de reflexão R . As curvas são, de baixo para cima, a de von Neumann e a de Tsallis ($q = 0,8$; $0,5$ e $0,3$).

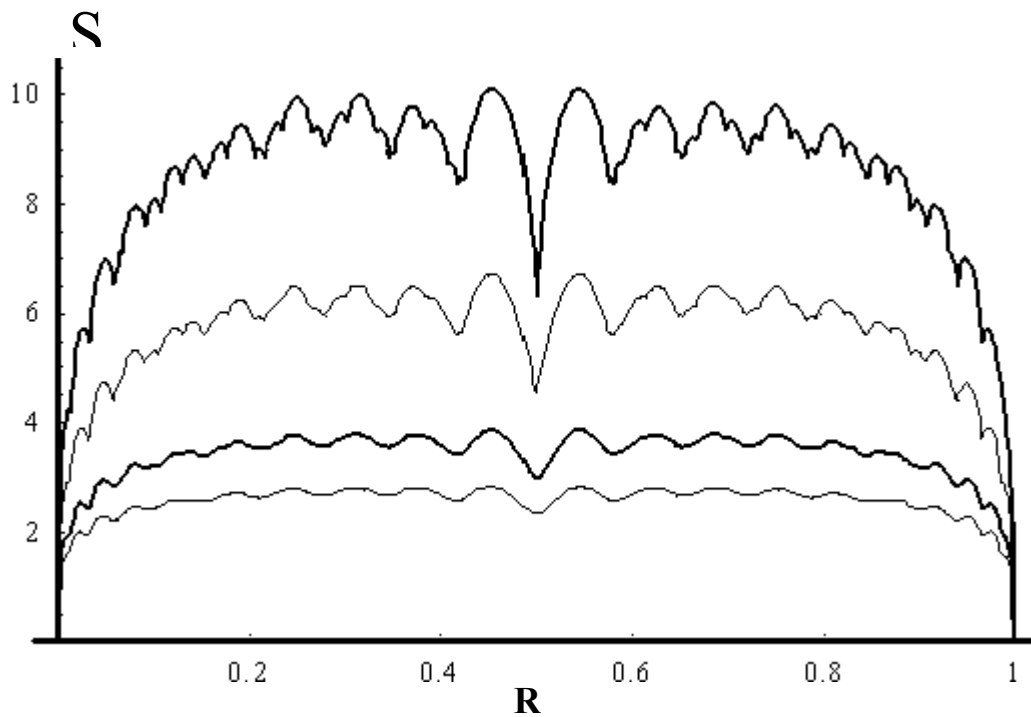


FIG. 5.5 - A medida do emaranhamento (entropia) é apresentada em função da amplitude de reflexão R . As curvas são, de baixo para cima, a de von Neumann e a de Tsallis ($q = 0,8$; $0,5$ e $0,3$).

3º caso: Campos de entrada com número de fótons diferentes

Na figura 5.6, apresentamos o caso em que foram colocados dois estados de Fock com número de fótons diferentes ($n_1 = 3$ e $n_2 = 7$) nas entradas do divisor de feixe. Na figura 5.7 apresentamos $n_1 = 12$ e $n_2 = 8$. Na figura 5.8, $n_1 = 16$ e $n_2 = 4$. Na figura 5.9, $n_1 = 15$ e $n_2 = 5$.

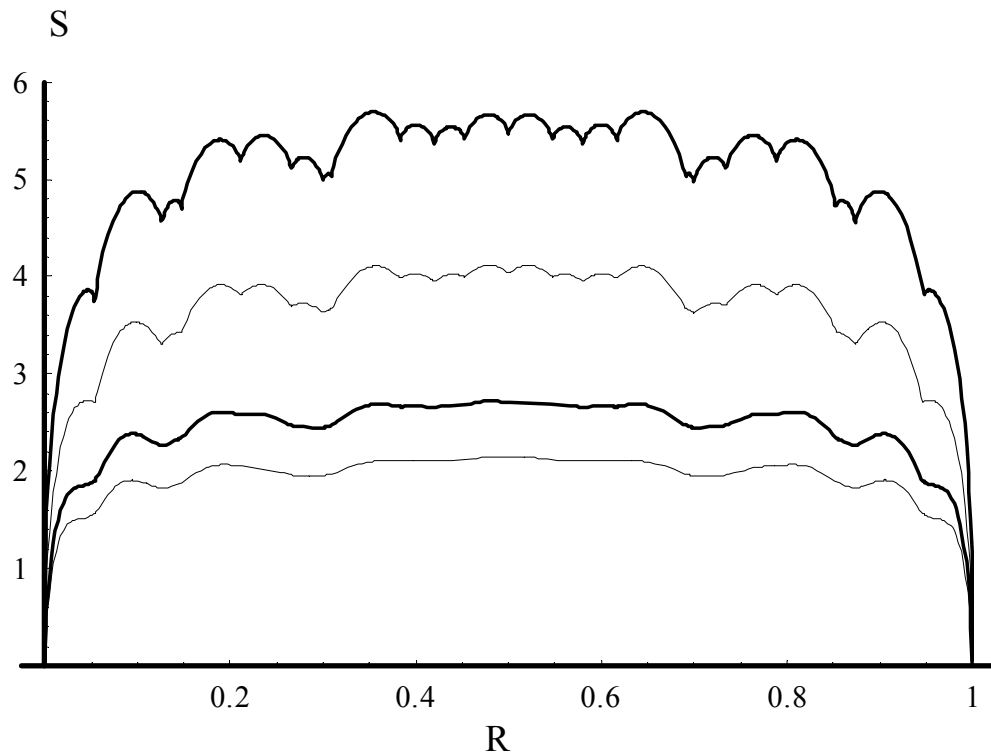


FIG. 5.6 - A medida do emaranhamento (entropia) é apresentada em função do da amplitude de reflexão R . As curvas são, de baixo para cima, a de von Neumann e a de Tsallis ($q = 0,8$; $0,5$ e $0,3$).

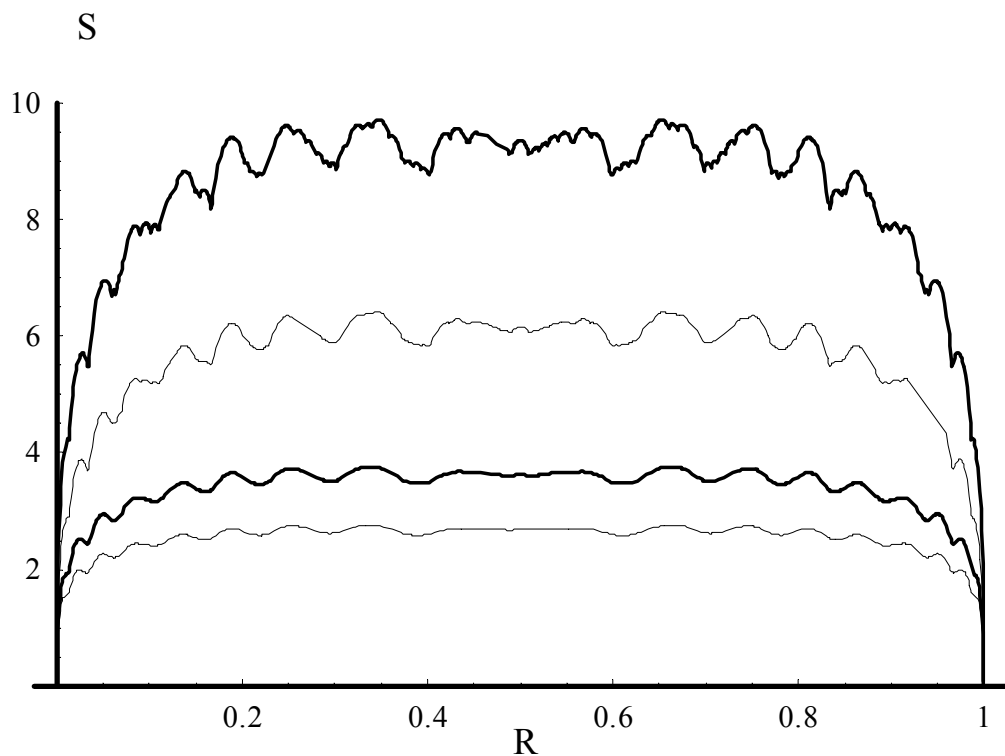


FIG. 5.7 - A medida do emaranhamento (entropia) é apresentada em função do da amplitude de reflexão R . As curvas são, de baixo para cima, a de von Neumann e a de Tsallis ($q = 0,8$; $0,5$ e $0,3$).

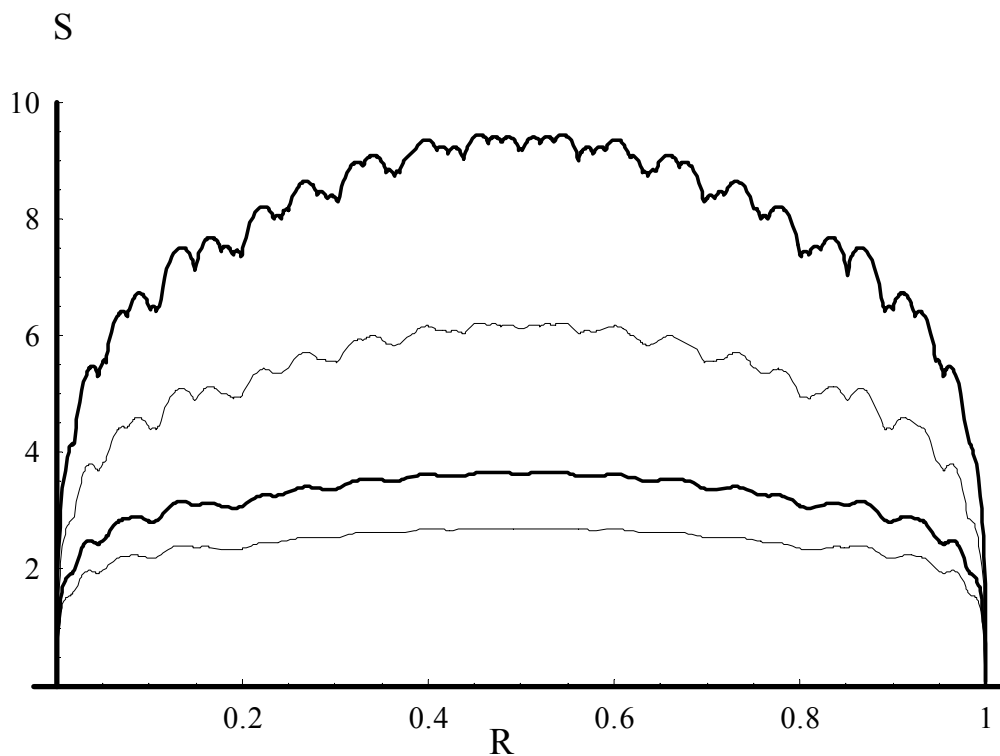


FIG. 5.8 - A medida do emaranhamento (entropia) é apresentada em função do da amplitude de reflexão R . As curvas são, de baixo para cima, a de von Neumann e a de Tsallis ($q = 0,8$; $0,5$ e $0,3$).

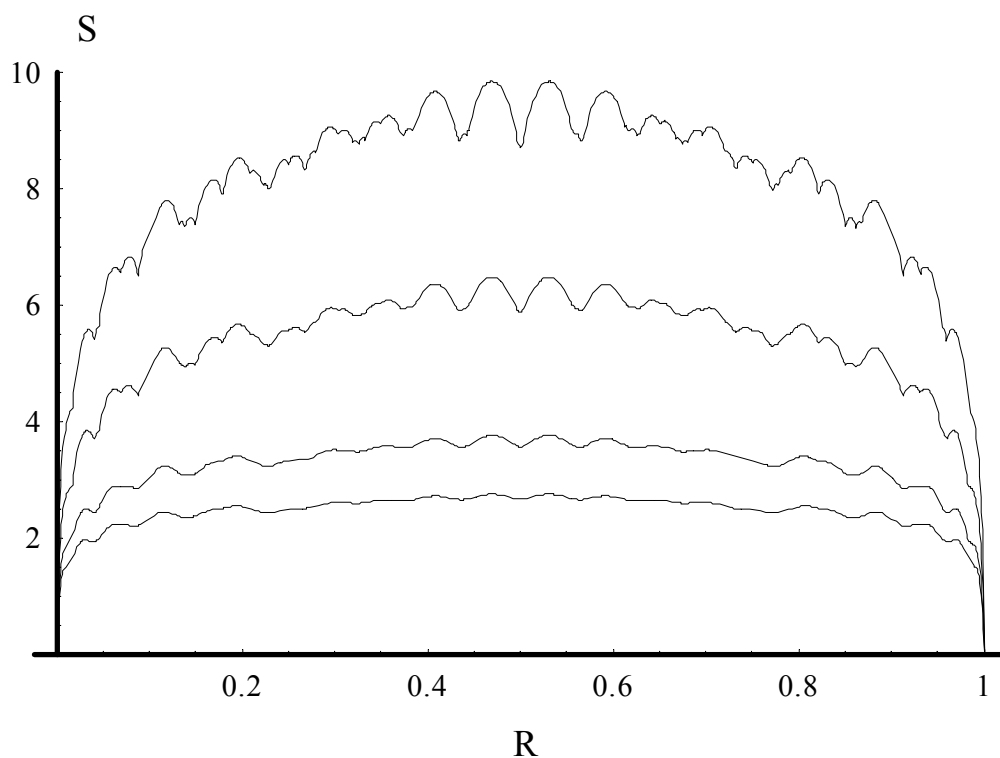


FIG. 5.9 - A medida do emaranhamento (entropia) é apresentada em função do da amplitude de reflexão R . As curvas são, de baixo para cima, a de von Neumann e a de Tsallis ($q = 0,8$; $0,5$ e $0,3$).

5.3 - Análise dos resultados

No 1º caso, tanto a entropia de von Neumann $S(\rho_c)$ quanto a de Tsallis $S_q(\rho_c)$, mostram que a medida do emaranhamento é uma função convexa com um máximo para um divisor de feixe 50:50, ou seja, $r = t = 1/\sqrt{2}$. Neste caso, a entropia de Tsallis não levantou nenhum aspecto qualitativamente novo, mesmo quando o número de fótons foi alterado de 10 (figura 5.2) para 20 (figura 5.3).

No 2º caso (figuras 5.4 e 5.5), é interessante notar que para um divisor 50 : 50 ($R = 0,5$) o emaranhamento sofre uma diminuição. Isto mostra que a possibilidade de fótons de “estados ímpares” é zero [21]. Este resultado é uma extensão do caso B $|1,1\rangle = (1/\sqrt{2})(|0,2\rangle + e^{i\phi}|2,0\rangle)$ [8]. Os estados de saída $|1,1\rangle$ podem resultar da transmissão ou reflexão de ambos os fótons. Os dois casos interferem destrutivamente e removem o estado de saída $|1,1\rangle$. De fato, o estado de saída de máximo emaranhamento está no espaço de Hilbert composto pelos estados $|0\rangle$ e $|2\rangle$. Podemos entender porque o emaranhamento não é maximizado quando o mesmo número de fótons é injetado em um divisor 50:50. Isto se deve ao fato dos estados de números ímpares interferirem destrutivamente e não aparecerem no estado de saída. Podemos então considerar que o estado de saída está em um espaço de Hilbert de dimensão $(n + 1)$ composto por $|0\rangle, |2\rangle, \dots, |2n\rangle$ ao invés de um espaço de dimensão $(2n + 1)$.

Podemos perceber que utilizando um divisor de feixe, temos duas maneiras de gerar estados emaranhados em um espaço de Hilbert de dimensão $(n + 1)$. A primeira é colocando um número total de n fótons em uma entrada do divisor e a outra maneira é colocando em cada uma das entradas n fótons em um divisor de feixe 50:50. Comparando as entropias nos dois casos, nós achamos que a última não gera o melhor emaranhamento, devido à ausência de alguns estados.

Nas figuras 5.4 e 5.5 , notamos que a entropia de Tsallis além de preservar o declive para $R = 0,5$ (evidenciando o comentário acima), ela apresenta uma maior sensibilidade para variações da amplitude de reflexão , principalmente para um número menor de fótons (figura 5.4).

Nas figuras 5.6 e 5.7 a entropia de Tsallis mostrou que o máximo emaranhamento não ocorre para $R = 0,5$, como sugerido pela entropia de von Neumann.

Na figura 5.8 embora a entropia de Tsallis tenha uma maior sensibilidade que a de von Neumann, o máximo emaranhamento também ocorre em $R = 0,5$. Isto se deve ao fato do número de fótons em uma das portas ser muito maior que o da outra , o que faz com que nos aproximemos dos resultados obtidos no 1º caso. Um comentário semelhante vale para o resultado da figura 5.9

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho fizemos um estudo comparativo de medidas de emaranhamento para o estado conjunto dos campos de saída de um divisor de feixes de luz. Consideramos o caso em que o estado conjunto dos campos de entrada do divisor de feixes é um produto de estados de número de fótons bem definido (estados de Fock).

Para medida do grau de emaranhamento do estado conjunto dos campos de saída do divisor de feixes utilizamos a entropia de von-Neumman (S) e a entropia não extensiva de Tsallis (S_q). Analisamos o comportamento de S_q para vários valores de q em função do coeficiente de reflexão e diferentes combinações de números de fótons nos campos de entrada e comparamos o caso $q = 1$ (von Neumman) e $0 < q < 1$.

Observamos que no caso em que o estado de vácuo $|0\rangle$ foi colocado em uma das portas de entrada do divisor de feixes, que a entropia de Tsallis não levantou nenhum aspecto qualitativamente novo, mesmo com a variação do número de fótons.

Verificamos também no caso em que o mesmo número de fótons foi colocado em cada uma das portas do divisor de feixes, que a entropia de Tsallis além de preservar as informações obtidas com a entropia de von Neumann, ainda apresentou uma maior sensibilidade para variações da amplitude de reflexão. Entretanto, para um número diferente de fótons em cada porta de entrada, a entropia de Tsallis distingue diferentes graus de emaranhamento a medida que q diminui ($0 < q < 1$). Essa ocorrência no qual parâmetros de emaranhamento fornecem graus diferentes já foi verificada em [28], no qual foi proposta uma medida baseada em correlações que distinguem fases dos estados, ou seja, estados com mesma distribuição de probabilidades que podem diferir por uma fase. No nosso caso, a diferença aparece pois o parâmetro q introduz um peso diferente as probabilidades relacionadas aos coeficientes da expansão dos estados de saída na base de estados de Fock.

Concluindo, a sensibilidade de S_q com o parâmetro q pode representar uma conexão entre propriedades intrínsecas do sistema físico (extensividade) e a medida do grau de emaranhamento. Por outro lado, podemos também considerar que a entropia não extensiva possa ser utilizada com uma medida complementar, ou seja, usada em conjunto com outras medidas. Algumas questões interessantes para trabalhos futuros seriam:

- estudar qual(is) propriedade(s) intrínseca(s) do sistema (caso exista(ão)) é (são) responsável(is) pela natureza não extensiva;
- comparar a entropia de Tsallis com outras medidas e diferentes estados iniciais dos campos de entrada e
- do ponto de vista matemático, procurar conectar emaranhamento e sua medida com a álgebra dos octônios.

Referências:

- [1] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, Phys. Rev. 47, 777 (1935).
- [2] A. K. Ekert, Phys. Rev. Lett. 67, 661 (1991); W. Tittel, J. Brendel, H. Zbinden, and N. Gisin, ibid. 81, 3563 (1998).
- [3] B. C. Sanders, Phys. Rev. A 45, 6811 (1992).
- [4] B. M. Boghosian, Phys. Rev. E 53, 4754 (1996).
- [5] C. H. Bennett and D. P. DiVincenzo, Nature (London) 404, 247 (2000).
- [6] C. H. Bennett and S. J. Wiesner, Phys. Rev. Lett. 69, 2881 (1992).
- [7] C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crepeau, R. Jozsa, A. Peres, and W. K. Wootters, Phys. Rev. Lett. 70, 1895 (1993).
- [8] C. K. Hong, Z. Y. Ou, and L. Mandel, Phys. Rev. Lett. 59, 2044 (1987).
- [9] C. Tsallis, F. C. Sá Barreto, E. D. Loh, Phys. Rev. E 52, 1447 (1995); Q. A. Wang, A. L. Mehaute, Phys. Lett. A 237, 28 (1997); E. K. Lenzi, R. S. Mendes, Phys. Lett. A 250 (1998) 270.
- [10] C. Tsallis, J. Sta. Phys. 52, 479 (1988).
- [11] D. H. Zanette and Alemany, Phys. Rev. Lett. 75, 366 (1995); C. Tsallis, S.V.F. Levy, A. M. C. Souza, R. Maynard, Phys. Rev. Lett. 75, 366 (1995).
- [12] J. von Neumann, The Mathematical Foundations of Quantum Mechanics, Princeton University Press, Princeton, 1955.
- [13] K. Wodkiewicz and J. H. Eberly, J. Opt. Soc. Am. B 3, 458 (1986).
- [14] L. Borland, A. R. Plastino, and C. Tsallis, J. Math. Phys. 39, 6490 (1998); J. Math. Phys. 40 2196 (E) (1999).
- [15] M. G. A. Paris, Phys. Rev. A 59, 1615 (1999).

- [16] P. G. Kwiat, S. Barraza-Lopez, A. Stefanov, and N. Gisin, *Nature* (London) 409, 1014 (2001).
- [17] R. A. Campos, B. E. A. Saleh, and M. C. Teich, *Phys. Rev. A* 40, 1371 (1989).
- [18] S. M. Tan, D. F. Walls, and M. J. Collet, *Phys. Rev. Lett.* 77, 285 (1990).
- [19] S. Scheel, L. Knoll, T. Opatrny, and D. G. Welsch, *Phys. Rev. A* 62, 043803 (2000).
- [20] V. Buzek and T. Quang, *J. Opt. Soc. Am. B* 6, 2447 (1989).
- [21] W. K. Lai and V. Buzek, *Phys. Rev. A* 43, 6323 (1991).
- [22] H. Walther, *J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.* 4, 418 (2002).
- [23] A. Vidiella – Barranco, *Phys. Lett. A* 260, 335 (1999).
- [24] Elliott H. Lieb & Michael Loss - *Analysis* – Graduate Studies in Mathematics – vol. 14, American Mathematical Society
- [25] Riesz, Frigyes & Sz. Nagy, Bela, *Functional Analysis*, Dover Publications, New York;
- [26] Cohen – Tannoudji, C., *Quantum Mechanics*, volume I, John Wiley & Sons, Inc (1977)
- [27] G. B. Arfken and H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, Academic Press, New York (1995)
- [28] V.V. Dodonov, A. S.M. de Castro and S. S. Mizrahi, *Phys. Lett. A* 296, 73-81 (2002)
- [29] B. Yurke, S. L. McCall, and J. R. Klauder, *Phys. Rev. A* 33, 4033 (1986)
- [30] J. Schwinger, U.S. Atomic Energy Commission Report. No. NYO-3071 (U.S. GPO, Washington, D.C., 1952) ; reprinted in Biedenharn and H. van Dam (Academic, NY, 1965)
- [31] U.M. Titulaer and R. J. Glauber, *Phys. Rev.* 145, 1041 (1966).
- [32] G. Baym, *Lectures on Quantum Mechanics* (Benjamin-Cummings, Reading, MA, 1969)
- [33] L. C. Biedenharn and J. D. Louck, *Angular Momentum in Quantum Physics: Theory and Application, Encyclopedia of Mathematics and its Applications* (translated from Russian by G. Cummins and T. Boddington)

- [34] I. M. Gel' fand, R. A. Minlos, and Z. Ya. Shapiro, *Representations of the Rotation and Lorentz Groups and their Applications* (Pergamon, Oxford, 1963) (translated from Russian by G. Cummins and T. Boddington)
- [35] B.L. Schumaker, Phys. Rep. 135,317(1986)
- [36] S. Prasad, M. O. Scully, and W. Martienssen, Opt. Commun. 62, 139(1987)
- [37] H. Araki and E. H. Lieb, *Commun. Math. Phys.* , 18 , 160 (1970)
- [38] V. V. Dodonov, W. D. José and S. S. Mizrahi, *J. Opt. B* , S567 (2003)
- [39] R. Godoy, G. Prativiera, M. Borges, *Quantificando emaranhamento em divisores de feixes via entropia não extensiva* , in: XXVIII CNMAC- Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional – São Paulo , setembro 2005, eletrônico.

Apêndice A

Campos de saída

Consideremos um divisor de feixe cuja geometria está representada na fig.A1.

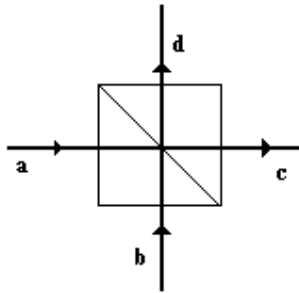


FIG. A.1 – Configuração da operação de um divisor de feixe.

Vamos obter o campo de saída **c** em função do campo de entrada **a** :

$$c = B a B^\dagger = \exp \left\{ \frac{\theta}{2} (a^\dagger b e^{i\phi} - a b^\dagger e^{-i\phi}) \right\} a \exp \left\{ - \frac{\theta}{2} (a^\dagger b e^{i\phi} - a b^\dagger e^{-i\phi}) \right\} \quad (A1)$$

Usando o teorema [27]

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \frac{1}{3!} [A, [A, [A, B]]] + \dots$$

Identificando os termos em (A1)

$$A = \frac{\theta}{2} (a^\dagger b e^{i\phi} - a b^\dagger e^{-i\phi})$$

$$B = a$$

temos,

$$\begin{aligned} c = B a B^\dagger &= a + \frac{\theta}{2} [(a^\dagger b e^{i\phi} - a b^\dagger e^{-i\phi}), a] + \\ &+ \frac{1}{2!} \left(\frac{\theta}{2}\right)^2 [(a^\dagger b e^{i\phi} - a b^\dagger e^{-i\phi}), [(a^\dagger b e^{i\phi} - a b^\dagger e^{-i\phi}), a]] + \dots \quad (A.2) \end{aligned}$$

Calculando os comutadores da equação acima (utilizando as relação canônica $[a, a^\dagger] = 1$ (cap. 2, eq. (2.21))), vem:

$$[(a^\dagger b e^{i\phi} - a b^\dagger e^{-i\phi}), a] = e^{i\phi} [a^\dagger, a] b - [a, a] b^\dagger e^{-i\phi} = -b e^{i\phi}$$

$$\begin{aligned} &[(a^\dagger b e^{i\phi} - a b^\dagger e^{-i\phi}), [(a^\dagger b e^{i\phi} - a b^\dagger e^{-i\phi}), a]] = [(a^\dagger b e^{i\phi} - a b^\dagger e^{-i\phi}), -b e^{i\phi}] = \\ &= -a^\dagger [b, b] e^{2i\phi} - a [b^\dagger, b] e^{-i\phi} e^{i\phi} = -a \end{aligned} \quad (A.3)$$

Substituindo os resultados obtidos em (A.3) em (A.2) obtemos:

$$\begin{aligned} c &= a - \frac{\theta}{2} b e^{i\phi} - \frac{1}{2!} \left(\frac{\theta}{2}\right)^2 a + \frac{1}{3!} \left(\frac{\theta}{2}\right)^3 b e^{i\phi} + \frac{1}{4!} \left(\frac{\theta}{2}\right)^4 a - \frac{1}{5!} \left(\frac{\theta}{2}\right)^5 b e^{i\phi} + \dots \\ &= a \left(1 - \frac{1}{2!} \left(\frac{\theta}{2}\right)^2 + \frac{1}{4!} \left(\frac{\theta}{2}\right)^4 + \dots\right) - b e^{i\phi} \left(\frac{\theta}{2} - \frac{1}{3!} \left(\frac{\theta}{2}\right)^3 + \frac{1}{5!} \left(\frac{\theta}{2}\right)^5 + \dots\right) \end{aligned}$$

$$= a \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - b e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = t a - r e^{i\phi} b \quad (\text{A.4})$$

Repetindo o processo para o campo de entrada $\mathbf{a}$, temos:

$$d = B b B^\dagger = b \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + a e^{-i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = t b + r e^{-i\phi} a \quad (\text{A.5})$$

Temos então

$$c = B a B^\dagger = t a - r e^{i\phi} b$$

$$d = B b B^\dagger = t b + r e^{-i\phi} a$$

Considerando os estados de entrada $|n_1\rangle_a$ e $|n_2\rangle_b$, os estados de saída serão:

$$B |n_1\rangle_a |n_2\rangle_b \quad (\text{A.6})$$

No capítulo 2 vimos que os estados de entrada podem ser construídos a partir da ação do operador criação sobre o estado de vácuo (eq.(2.68)):

$$|n_1\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{n_1!}} (a^\dagger)^{n_1} |0\rangle_a \quad (\text{A.7})$$

$$|n_2\rangle_b = \frac{1}{\sqrt{n_2!}} (b^\dagger)^{n_2} |0\rangle_b \quad (\text{A.8})$$

e usando o fato que $B^\dagger B = 1$ (capítulo 4), temos:

$$\begin{aligned} B |n_1\rangle_a |n_2\rangle_b &= B \frac{1}{\sqrt{n_1!}} \frac{1}{\sqrt{n_2!}} (a^\dagger)^{n_1} (b^\dagger)^{n_2} |0\rangle_a |0\rangle_b = \\ &= \frac{1}{\sqrt{n_1!}} \frac{1}{\sqrt{n_2!}} B a^\dagger (B^\dagger B) a^\dagger (B^\dagger B) \dots B a^\dagger (B^\dagger B) b^\dagger (B^\dagger B) \dots B b^\dagger (B^\dagger B) |0\rangle_a |0\rangle_b \end{aligned}$$

$$B | n_1 \rangle_a | n_2 \rangle_b = \frac{1}{\sqrt{n_1!}} \frac{1}{\sqrt{n_2!}} (c^\dagger)^{n_1} (d^\dagger)^{n_2} B | 0, 0 \rangle, \quad (A.9)$$

mas

$$\begin{aligned} B | 0, 0 \rangle &= \exp \left\{ \frac{\theta}{2} (a^\dagger b e^{i\phi} - a b^\dagger e^{-i\phi}) \right\} | 0, 0 \rangle = \\ &= \left(1 + i \frac{\theta}{2} (a^\dagger b e^{i\phi} - a b^\dagger e^{-i\phi}) + \frac{1}{2!} \left(i \frac{\theta}{2} \right)^2 (a^\dagger b e^{i\phi} - a b^\dagger e^{-i\phi})^2 + \dots \right) | 0, 0 \rangle \end{aligned} \quad (A.10)$$

Podemos notar na expressão acima que a partir do segundo termo da série, o operador destruição **a** ou **b** aparece elevado a alguma potência e aplicado no vácuo. Do capítulo 2, temos que (Lema II):

$$a | 0 \rangle = b | 0 \rangle = 0 \quad (A.11)$$

e portanto,

$$B | 0, 0 \rangle = | 0, 0 \rangle \quad (A.12)$$

Substituindo o resultado na equação (A.9) temos:

$$\begin{aligned} B | n_1 \rangle_a | n_2 \rangle_b &= \frac{1}{\sqrt{n_1!}} \frac{1}{\sqrt{n_2!}} (c^\dagger)^{n_1} (d^\dagger)^{n_2} | 0, 0 \rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{n_1!}} \frac{1}{\sqrt{n_2!}} (t a^\dagger - r e^{-i\phi} b^\dagger)^{n_1} (t b^\dagger + r e^{i\phi} a^\dagger)^{n_2} | 0, 0 \rangle \end{aligned} \quad (A.13)$$

Utilizando na equação acima a expansão binomial

$$(x + y)^n = \sum_{l=0}^n \frac{n!}{(n-l)!l!} x^{n-l} y^l \quad (A.14)$$

temos:

$$\begin{aligned}
 B | n_1 >_a | n_2 >_b &= \sum_{k=0}^{n_1} \sum_{l=0}^{n_2} \frac{(ta^+)^k (-re^{-i\phi} b^+)^{n_1-k} (tb^+)^l (re^{i\phi} a^+)^{n_2-l} \sqrt{n_1! n_2!}}{k!(n_1-k)! l!(n_2-l)!} | 0, 0 > = \\
 &= \sum_{k=0}^{n_1} \sum_{l=0}^{n_2} \frac{(-1)^{n_1-k} e^{-i\phi(n_1-n_2-k+l)} r^{n_1+n_2-k-l} t^{k+l} \sqrt{n_1! n_2!}}{k!(n_1-k)! l!(n_2-l)!} (a^\dagger)^{n_2+k-l} | 0 >_a (b^\dagger)^{n_1+l-k} | 0 >_b
 \end{aligned}
 \tag{A.15}$$

Utilizando a eq. (2.68) do capítulo 2, temos:

$$\begin{aligned}
 (a^\dagger)^{n_2+k-l} | 0 >_a &= \sqrt{(n_2+k-l)!} \left(\frac{(a^+)^{n_2+k-l}}{\sqrt{(n_2+k-l)!}} | 0 >_a \right) = \sqrt{(n_2+k-l)!} | n_2+k-l >_a \\
 (b^\dagger)^{n_1+l-k} | 0 >_b &= \sqrt{(n_1+l-k)!} \left(\frac{(b^+)^{n_1+l-k}}{\sqrt{(n_1+l-k)!}} | 0 >_b \right) = \sqrt{(n_1+l-k)!} | n_1+l-k >_b
 \end{aligned}
 \tag{A.16}$$

Finalmente

$$\begin{aligned}
 B | n_1 >_a | n_2 >_b &= \\
 &= \sum_{k=0}^{n_1} \sum_{l=0}^{n_2} \frac{(-1)^{n_1-k} e^{-i\phi(n_1-n_2-k+l)} r^{n_1+n_2-k-l} t^{k+l} \sqrt{n_1! n_2! (n_2+k-l)! (n_1-k+l)!}}{k!(n_1-k)! l!(n_2-l)!} \\
 &\quad \times | n_2+k-l, n_1+l-k >
 \end{aligned}
 \tag{A.17}$$