MECÂNICA QUÂNTICA I

LEFT – 3º ANO, 1º Sem (P1). (2021/2022)

SUMÁRIO:

Formalismo da MQ (Griff. 3, Gas. 6-7; 9)

- Espaços de Hilbert
- Notação de Dirac
- Operadores lineares e suas propriedades
- Representação matricial de operadores
- Evolução temporal dos estados em MQ
- Teoremas/resultados importantes

DF
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
TÉCNICO LISBOA

Filipe Rafael Joaquim

Centro de Física Teórica de Partículas (CFTP) – DF -IST

filipe.joaquim@tecnico.ulisboa.pt , Ext: 3704 , Gab. 4-8.3

Aula 5 (15-10-2021)

Até agora temos abordado a MQ numa ótica de "take what you need"

No entanto existe um formalismo que concretiza o que já vimos de uma forma mais rigorosa

Este formalismo é um pouco abstracto mas vai ajudar a consolidar conceitos e, em muitos casos, facilitar cálculos.

- **Espaço vetorial linear $\mathcal{V}$:** vetores $\psi, \phi, \chi, \ldots$ e escalares $a, b, c, \ldots$

- **Regra de adição em $\mathcal{V}$:**
  - Se $\psi, \phi \in \mathcal{V}$ (são elementos de $\mathcal{V}$) então $\psi + \phi \in \mathcal{V}$
  - **Comutatividade:** $\psi + \phi = \phi + \psi$
  - **Associatividade:** $(\psi + \phi) + \chi = \psi + (\phi + \chi)$
  - **Existência de vetor neutro $\mathit{0}$:** $0 + \psi = \psi + 0$
  - **Existência de vetor simétrico $(-\boldsymbol{\psi})$:** $(-\psi) + \psi = \psi + (-\psi) = 0$

- **Regra de multiplicação:**
  - Qualquer combinação linear de vetores de $\mathcal{V}$ é elemento de $\mathcal{V}$, i.e. $a\psi + b\phi \in \mathcal{V}$
  - **Distributividade em relação à adição:** $(a + b)\psi = a\psi + b\psi \, , a(\psi + \phi) = a\psi + a\phi$
  - **Associatividade:** $a(b\psi) = (ab)\psi$
  - **Existência de escalar neutro 1:** $1\psi = \psi 1 = \psi$
  - **Existência de escalar absorvente $\boldsymbol{o}$:** $o\psi = \psi o = o$

ESPAÇOS DE HILBERT

- **MECÂNICA QUÂNTICA:** $\int \psi^* \psi \, d\vec{r} > 0$ precisamos de um "produto interno"

- **Vetores:** $\vec{u}, \vec{v} \in \mathbb{C}^n$. Então $(\vec{u}, \vec{v}) = \sum_{k=1}^{n} u_k^* \, v_k = (\vec{v}, \vec{u})^*$ ou $\vec{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \dots \\ u_n \end{bmatrix}, \vec{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \dots \\ v_n \end{bmatrix}$

$$(\vec{u}, \vec{v}) = (\vec{u})^\dagger . \vec{v} = \begin{bmatrix} u_1^* & u_2^* & \dots & u_n^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \dots \\ v_n \end{bmatrix} = \sum_{k=1}^{n} u_k^* \, v_k$$

- **Funções:** $f, g \in \mathcal{V}$. Então:

$$(f, g) = \int f^*(x) g(x) \, dx < \infty$$

Tem propriedades de produto interno.

PROBLEMA 0.5
SÉRIE 0

ESPAÇO VETORIAL + PRODUTO INTERNO = ESPAÇO DE HILBERT $\mathcal{H}$

AS FUNÇÕES DE ONDA "VIVEM" NUM ESPAÇO DE HILBERT

Existem outros requisitos que em Física são sempre verificados (pelo menos nos sistemas que vamos estudar)

MECÂNICA QUÂNTICA:

$$\psi$$

Funções de onda descrevem os estados do sistema.

NOTAÇÃO DE DIRAC: O estado descrito pela função de onda ψ é representado por um objeto denominado **"ket" $|\psi\rangle$** de tal modo que
$|\psi\rangle \in \mathcal{H}$

A cada "ket" $|\psi\rangle$ corresponde um (e apenas um) elemento do espaço dual denominado por **"bra" $\langle\psi|$** de tal modo que
$\langle\psi| \in \widetilde{\mathcal{H}}$

Nesta notação podemos definir um **"bra-ket"**:

$$(\phi, \psi) \equiv \langle\phi|\psi\rangle = \int \phi^*(x)\psi(x)dx$$

- **A cada ket corresponde um único bra:** $| \psi \rangle \quad \longleftrightarrow \quad \langle \psi |$

- **Existe uma relação 1 para 1 entre bras e kets:**

$$\boxed{\begin{array}{c} a \,|\, \psi\rangle + b \,|\, \phi\rangle \quad \longleftrightarrow \quad a^* \langle \psi \,| + b^* \langle \phi \,| \\ |\, a\psi \rangle = a \,|\, \psi\rangle, \;\; \langle a\psi \,| = a^* \langle \psi \,| \end{array}}$$

- **Propriedades dos bra-kets:**

$$\langle \phi \mid \psi \rangle^* = \left(\int \phi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)\, d^3r \right)^* = \int \psi^*(\vec{r},t)\phi(\vec{r},t)\, d^3r = \langle \psi \mid \phi \rangle \longrightarrow \boxed{\langle \phi \mid \psi \rangle^* = \langle \psi \mid \phi \rangle}$$

- **Outras propriedades:**

$$\begin{aligned} \langle \psi \mid a_1\psi_1 + a_2\psi_2 \rangle &= a_1 \langle \psi \mid \psi_1 \rangle + a_2 \langle \psi \mid \psi_2 \rangle, \\ \langle a_1\phi_1 + a_2\phi_2 \mid \psi \rangle &= a_1^* \langle \phi_1 \mid \psi \rangle + a_2^* \langle \phi_2 \mid \psi \rangle, \\ \langle a_1\phi_1 + a_2\phi_2 \mid b_1\psi_1 + b_2\psi_2 \rangle &= a_1^* b_1 \langle \phi_1 \mid \psi_1 \rangle + a_1^* b_2 \langle \phi_1 \mid \psi_2 \rangle \\ &\quad + a_2^* b_1 \langle \phi_2 \mid \psi_1 \rangle + a_2^* b_2 \langle \phi_2 \mid \psi_2 \rangle \end{aligned}$$

NOTAÇÃO DE DIRAC – Kets e Bras

- **Normalização:** $\langle\psi \mid \psi\rangle = 1$. Se $\langle\psi \mid \psi\rangle = 0$ então $\mid \psi\rangle = O$ onde O é o vetor "zero".

- **Desigualdade de Schwartz:** $|\vec{A}\cdot\vec{B}|^2 \leq |\vec{A}|^2 |\vec{B}|^2 \longrightarrow |\langle\psi \mid \phi\rangle|^2 \leq \langle\psi \mid \psi\rangle\langle\phi \mid \phi\rangle$

- **Desigualdade triangular:**

$$|\vec{A}+\vec{B}| \leq |\vec{A}| + |\vec{B}| \longrightarrow \sqrt{\langle\psi+\phi \mid \psi+\phi\rangle} \leq \sqrt{\langle\psi \mid \psi\rangle} + \sqrt{\langle\phi \mid \phi\rangle}$$

- **Estados ortonormais:** $\langle\psi \mid \phi\rangle = 0,\ \langle\psi \mid \psi\rangle = 1,\ \langle\phi \mid \phi\rangle = 1$

- **Coisas que não existem:** $\mid \psi\rangle \mid \phi\rangle$ ou $\langle\psi \mid \langle\phi \mid$. Vamos ver mais para a frente que o que poderemos definir é $\mid \psi\rangle \otimes \mid \phi\rangle$ onde o produto é tensorial e os dois kets pertencem a espaços vetoriais diferentes (por ex. momento angular e spin).

$$\mid \psi\rangle = \begin{pmatrix} -3i \\ 2+i \\ 4 \end{pmatrix}, \quad \mid \phi\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ -i \\ 2-3i \end{pmatrix} \xrightarrow{\langle\phi \mid = (2 \quad i \quad 2+3i)} \langle\phi \mid \psi\rangle$$

$$\begin{aligned} \langle\phi \mid \psi\rangle &= (2 \quad i \quad 2+3i)\begin{pmatrix} -3i \\ 2+i \\ 4 \end{pmatrix} \\ &= 2(-3i) + i(2+i) + 4(2+3i) \\ &= 7+8i. \end{aligned}$$

$\mid \psi\rangle \mid \phi\rangle \longrightarrow$ Não existe

Significado físico do bra-ket:

$\vec{A} \cdot \vec{B}$ - projeção de um vetor noutro $\longrightarrow$ $\langle \phi \mid \psi \rangle$ - projeção de um estado noutro

Probabilidade de um estado $|\psi\rangle$, após se realizar uma medida, se encontrar no estado $|\phi\rangle$

Exemplo: $|\psi_1\rangle = 2i|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle - a|\phi_3\rangle + 4|\phi_4\rangle$, $|\psi_2\rangle = 3|\phi_1\rangle - i|\phi_2\rangle + 5|\phi_3\rangle - |\phi_4\rangle$

onde $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle, |\phi_4\rangle$ são ortonormais. Determinar a tal de modo que $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ são ortogonais.

$$\begin{aligned} \langle \psi_2 \mid \psi_1 \rangle &= (3\langle\phi_1| + i\langle\phi_2| + 5\langle\phi_3| - \langle\phi_4|)(2i|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle - a|\phi_3\rangle + 4|\phi_4\rangle) \\ &= 7i - 5a - 4. \xrightarrow[= 0]{} a = (7i-4)/5 \end{aligned}$$

Practice the Dirac notation

$$| \psi \rangle = 3i \mid \phi_1 \rangle - 7i \mid \phi_2 \rangle$$

$$| \chi \rangle = - \mid \phi_1 \rangle + 2i \mid \phi_2 \rangle$$

(a) $| \psi + \chi \rangle, \langle \psi + \chi |$

(b) $\langle \psi \mid \chi \rangle$, $\langle \chi \mid \psi \rangle$

(c) Mostre que $|\psi\rangle$ e $|\chi\rangle$ obedecem às desigualdades de Schwarz e triangular.

OPERADORES - Propriedades

Operador $\hat{A}$: Ket → Ket; Bra → Bra

$$\hat{A}\,\psi(\vec{r},t) = \psi'(\vec{r},t) \longrightarrow \hat{A} \mid \psi\rangle = \mid \psi'\rangle,\ \langle\phi \mid \hat{A} = \langle\phi' \mid$$

Algumas propriedades:

- **Podem não comutar:** $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$
- $\hat{A}\hat{B}\hat{C} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C}$
- $\hat{A}^n\hat{A}^m = \hat{A}^{n+m}$
- $\hat{A}\hat{B} \mid \psi\rangle = \hat{A}(\hat{B} \mid \psi\rangle)$

$$\langle\phi \mid (\hat{A} \mid \psi\rangle) = (\langle\phi \mid \hat{A}) \mid \psi\rangle$$

$$\equiv \langle\phi \mid \hat{A} \mid \psi\rangle$$ - número complexo

$$= \int \phi^*(\vec{r})\,\hat{A}\,\psi(\vec{r})\,d\vec{r}$$

- **Operadores lineares:** $\hat{A}\,(a_1 \mid \psi_1\rangle + a_2 \mid \psi_2\rangle) = a_1\hat{A} \mid \psi_1\rangle + a_2\hat{A} \mid \psi_2\rangle$

$$(\langle\psi_1 \mid a_1 + \langle\psi_2 \mid a_2)\hat{A} = a_1\langle\psi_1 \mid \hat{A} + a_2\langle\psi_2 \mid \hat{A}$$

VALOR MÉDIO DE UM OPERADOR:

Estamos a ter em conta que $|\psi\rangle$ pode não estar normalizado.

$$\langle\hat{A}\rangle = \frac{\int \psi^*(\vec{r})\,\hat{A}\,\psi(\vec{r})\,d\vec{r}}{\int \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})\,d\vec{r}} \equiv \frac{\langle\psi \mid \hat{A} \mid \psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

OPERADORES - Propriedades

O conjugado hermítico:

- Escalares: $\alpha^\dagger = \alpha^*$
- Operadores (hermítico adjunto, adjunto, hermítico conjugado): $\hat{A}^\dagger$

$$\boxed{\langle \phi \mid \hat{A} \mid \psi \rangle^* = \langle \psi \mid \hat{A}^\dagger \mid \phi \rangle}$$

RECEITA: Quando queremos encontrar o hermítico conjugado de uma expressão que envolve Kets, Bras e operadores, temos que reverter a ordem dos factores ciclicamente e:

- Substituir as constantes pelas suas complexas conjugadas;
- Substituir os Kets (Bras) por Bras (Kets);
- Substituir os operadores pelos seus adjuntos.

Exemplo: $(1+i)\hat{A}\hat{B}^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{B}\hat{A}^\dagger(1-i) = (1-i)\langle\psi|\hat{B}\hat{A}^\dagger$

Algumas propriedades:

$$
\begin{aligned}
(\hat{A}^\dagger)^\dagger &= \hat{A}, \\
(a\hat{A})^\dagger &= a^*\hat{A}^\dagger, \\
(\hat{A}^n)^\dagger &= (\hat{A}^\dagger)^n, \\
(\hat{A}+\hat{B}+\hat{C}+\hat{D})^\dagger &= \hat{A}^\dagger+\hat{B}^\dagger+\hat{C}^\dagger+\hat{D}^\dagger, \\
(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D})^\dagger &= \hat{D}^\dagger\hat{C}^\dagger\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger, \\
(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D} \mid \psi\rangle)^\dagger &= \langle\psi \mid D^\dagger C^\dagger B^\dagger A^\dagger.
\end{aligned}
$$

Os operadores atuam dentro dos Bras e Kets:

$$\mid \alpha\hat{A}\psi\rangle = \alpha\hat{A} \mid \psi\rangle, \langle \alpha\hat{A}\psi \mid = \alpha^*\langle\psi \mid \hat{A}^\dagger$$

$$\langle \alpha\hat{A}^\dagger\psi \mid = \alpha^*\langle\psi \mid (\hat{A}^\dagger)^\dagger = \alpha^*\langle\psi \mid \hat{A}$$

$$\longrightarrow \langle\psi \mid \hat{A} \mid \phi\rangle = \langle \hat{A}^\dagger\psi \mid \phi\rangle = \langle\psi \mid \hat{A}\phi\rangle$$

$\mid \psi\rangle\langle\phi \mid$ **É um operador!**

É fácil de ver que: $(\mid \psi\rangle\langle\phi \mid)^\dagger = \mid \phi\rangle\langle\psi \mid$

Um operador diz-se hermítico se:

$$\hat{A} = \hat{A}^{\dagger} \quad \text{ou} \ \langle \psi \mid \hat{A} \mid \phi \rangle = \langle \phi \mid \hat{A} \mid \psi \rangle^{*}.$$

Um operador diz-se anti-hermítico se:

$$\hat{B}^{\dagger} = -\hat{B} \ \text{ou} \ \langle \psi \mid \hat{B} \mid \phi \rangle = -\langle \phi \mid \hat{B} \mid \psi \rangle^{*}.$$

Operador projetor: $\hat{P}^{\dagger} = \hat{P}, \qquad \hat{P}^2 = \hat{P}$

Exemplo: $\mid \psi \rangle \langle \psi \mid$ é um operador projetor

$$(\mid \psi \rangle \langle \psi \mid)^2 = (\mid \psi \rangle \langle \psi \mid)(\mid \psi \rangle \langle \psi \mid) = \mid \psi \rangle \underbrace{\langle \psi \mid \psi \rangle}_{=1} \langle \psi \mid = \mid \psi \rangle \langle \psi \mid$$

Funções de operadores: Se $\hat{A}$ é um operador linear podemos escrever uma expansão em série de Taylor:

$$F(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \hat{A}^n \qquad \textbf{Exemplo:} \ e^{a\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!} \hat{A}^n = \hat{I} + a\hat{A} + \frac{a^2}{2!}\hat{A}^2 + \frac{a^3}{3!}\hat{A}^3 + \cdots$$

Valores/estados próprios de um operador

$|\psi\rangle$ é estado próprio de $\hat{A}$ com valor próprio a: $\hat{A}\,|\,\psi\rangle\ =\ a\,|\,\psi\rangle$

- Operador identidade: $\hat{I}\,|\,\psi\rangle = |\,\psi\rangle$
- Potências de operadores: $\hat{A}\,|\,\psi\rangle\ =\ a\,|\,\psi\rangle \longrightarrow \hat{A}^n\,|\,\psi\rangle\ =\ a^n\,|\,\psi\rangle$
- $F(\hat{A})\,|\,\psi\rangle = F(a)\,|\,\psi\rangle$ **Exemplo:** $\hat{A}\,|\,\psi\rangle\ =\ a\,|\,\psi\rangle \longrightarrow e^{i\hat{A}}\,|\,\psi\rangle\ =\ e^{ia}\,|\,\psi\rangle$

TEOREMA: Os valores próprios de um operador hermítico são reais, e os estados próprios correspondentes a valores próprios diferentes são ortogonais.

Prova:

$$\hat{A}\,|\,\phi_n\rangle\ =\ a_n\,|\,\phi_n\rangle \xrightarrow{\langle\phi_m\,|} \langle\phi_m\,|\,\hat{A}\,|\,\phi_n\rangle\ =\ a_n\langle\phi_m\,|\,\phi_n\rangle$$

$$\langle\phi_m\,|\,\hat{A}^\dagger = a_m^*\langle\phi_m\,| \xrightarrow{|\,\phi_n\rangle} \langle\phi_m\,|\,\hat{A}^\dagger\,|\,\phi_n\rangle\ =\ a_m^*\langle\phi_m\,|\,\phi_n\rangle$$

$$\xrightarrow[\hat{A}=\hat{A}^\dagger]{\text{subtraindo}} (a_n - a_m^*)\langle\phi_m\,|\,\phi_n\rangle\ =\ 0\ \begin{cases} m=n:\ \langle\phi_n\,|\,\phi_n\rangle > 0 \longrightarrow a_n = a_n^* \\ m\neq n:\ \ a_n \neq a_m^* \longrightarrow \langle\phi_m\,|\,\phi_n\rangle\ =\ 0 \end{cases}$$

TEOREMA: se dois operadores hermíticos $\hat{A}$ e $\hat{B}$ comutam, e $\hat{A}$ não tem valores próprios degenerados, então cada estado próprio de $\hat{A}$ é também estado próprio de $\hat{B}$.

Prova: temos $\hat{A}\mid\phi_n\rangle = a_n\mid\phi_n\rangle$

Como $\hat{A}$ e $\hat{B}$ comutam: $\hat{B}\hat{A}\mid\phi_n\rangle = \hat{A}\hat{B}\mid\phi_n\rangle \longrightarrow \hat{A}(\hat{B}\mid\phi_n\rangle) = a_n(\hat{B}\mid\phi_n\rangle)$

Então, $\hat{B}\mid\phi_n\rangle$ é estado próprio de $\hat{A}$ com valor próprio a_n. Como este estado próprio é único, então $\mid\phi_n\rangle$ é também estado próprio de $\hat{B}$, i.e. $\hat{B}\mid\phi_n\rangle = b_n\mid\phi_n\rangle$.

Conclusão importante: como cada estado próprio de $\hat{A}$ é também estado próprio de $\hat{B}$, então estes operadores partilham uma base comum e é única.

E se $\hat{A}$ tiver valores próprios degenerados?

$$\left.\begin{aligned}\hat{A}|\phi_n\rangle &= a_n|\phi_n\rangle\\ \hat{A}|\phi_m\rangle &= a_n|\phi_m\rangle\end{aligned}\right\} \longrightarrow$$

E se $\hat{A}$ tiver valores próprios degenerados? mas podemos ter: $\hat{B}|\phi_n\rangle = b_n|\phi_m\rangle$

Logo, $|\phi_n\rangle$ não é necessariamente estado próprio de $\hat{B}$

Vamos considerar um espaço de Hilbert gerado por uma base (discreta) completa

$$\{|\phi_n\rangle\} = \{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle, \ldots\} \equiv \{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \ldots\}$$

- Expansão: $|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n |\phi_n\rangle$
- Operador identidade: $\sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \hat{I}$

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \hat{I} \longrightarrow |\psi\rangle = \hat{I}|\psi\rangle = \left(\sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle \underbrace{\langle\phi_n|\right)|\psi\rangle}_{a_n} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n |\phi_n\rangle$$

- Tal como representamos um vetor numa base:

$$|\psi\rangle \longrightarrow \begin{pmatrix} \langle\phi_1|\psi\rangle \\ \langle\phi_2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle\phi_n|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \langle\psi| \longrightarrow & \ (\langle\psi|\phi_1\rangle \ \langle\psi|\phi_2\rangle \ \cdots \ \langle\psi|\phi_n\rangle \ \cdots) \\ = & \ (\langle\phi_1|\psi\rangle^* \ \langle\phi_2|\psi\rangle^* \ \cdots \ \langle\phi_n|\psi\rangle^* \\ = & \ (a_1^* \ a_2^* \ \cdots \ a_n^* \ \cdots). \end{aligned}$$

$$\langle\psi|\phi\rangle = (a_1^* \ a_2^* \ \cdots \ a_n^* \ \cdots)\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_n a_n^* b_n$$

Tal como fazemos para vetores definidos numa base euclidiana.

- Operadores: $\hat{A} = \hat{I}\hat{A}\hat{I} = \left(\sum_{n=1}^{\infty} \mid \phi_n\rangle\langle\phi_n \mid\right)\hat{A}\left(\sum_{m=1}^{\infty} \mid \phi_m\rangle\langle\phi_m \mid\right) = \sum_{nm} A_{nm} \mid \phi_n\rangle\langle\phi_m \mid$

$$A_{nm} = \langle\phi_n \mid \hat{A} \mid \phi_m\rangle$$

Representação matricial: $A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \cdots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$

Obviamente, se tivermos a representação matricial de um operador, os valores e vetores próprios desse operador são os da matriz que o representa.

Para operadores hermíticos a matriz que representa o operador é hermítica

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \cdots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}^{\dagger} = \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* & A_{31}^* & \cdots \\ A_{12}^* & A_{22}^* & A_{32}^* & \cdots \\ A_{13}^* & A_{23}^* & A_{33}^* & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\left.\begin{aligned} b_n &= \langle\phi_n \mid \phi\rangle \\ a_m &= \langle\phi_m \mid \psi\rangle \end{aligned}\right\}$$

$$\begin{aligned} \langle\phi \mid \hat{A} \mid \psi\rangle &= \langle\phi \mid \hat{I}\hat{A}\hat{I} \mid \psi\rangle = \langle\phi \mid \left(\sum_{n=1}^{\infty} \mid \phi_n\rangle\langle\phi_n \mid\right)\hat{A}\left(\sum_{m=1}^{\infty} \mid \phi_m\rangle\langle\phi_m \mid\right) \mid \psi\rangle \\ &= \sum_{nm}\langle\phi \mid \phi_n\rangle\langle\phi_n \mid \hat{A} \mid \phi_m\rangle\langle\phi_m \mid \psi\rangle = \sum_{nm} b_n^* A_{nm} a_m \end{aligned}$$

EXEMPLOS – Oscilador harmónico

- Funções próprias $\psi_n \longrightarrow \{|0\rangle,\ |1\rangle,\ |2\rangle, \ldots\}$

$$\boxed{\hat{a}_+\psi_n = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}, \quad \hat{a}_-\psi_n = \sqrt{n}\,\psi_{n-1}} \rightarrow \boxed{\hat{a}_+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\,,\ \hat{a}_-|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle}$$

$$\langle n'|\hat{a}_-|\,n\rangle = \sqrt{n}\delta_{n',n-1} \longrightarrow \hat{a}_- = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\langle n'|\hat{a}_+\,|\,n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} \longrightarrow \hat{a}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

- Operadores posição e momento:

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\hat{a}_- + \hat{a}_+)\,, \quad \hat{P} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,(\hat{a}_+ - \hat{a}_-)$$

- **Elementos de matriz:**

$$\langle n'|\hat{X}\,|\,n\rangle \;=\; \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\delta_{n',n-1}+\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}\right),$$
$$\langle n'|\hat{P}\,|\,n\rangle \;=\; i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(-\sqrt{n}\delta_{n',n-1}+\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}\right)$$

$$\boxed{\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad \hat{P} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}}$$

- **Para um estado próprio:** $\langle n\,|\,\hat{X}\,|\,n\rangle = \langle n\,|\,\hat{P}\,|\,n\rangle = 0$

$$\hat{X}^2 \;=\; \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\hat{a}^2+\hat{a}^{\dagger 2}+\hat{a}\hat{a}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{a}\right) = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\hat{a}^2+\hat{a}^{\dagger 2}+2\hat{a}^\dagger\hat{a}+1\right),$$
$$\hat{P}^2 \;=\; -\frac{m\hbar\omega}{2}\left(\hat{a}^2+\hat{a}^{\dagger 2}-\hat{a}\hat{a}^\dagger-\hat{a}^\dagger\hat{a}\right) = -\frac{m\hbar\omega}{2}\left(\hat{a}^2+\hat{a}^{\dagger 2}-2\hat{a}^\dagger\hat{a}-1\right)$$

$$\boxed{\begin{aligned}\langle n\,|\,\hat{X}^2\,|\,n\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n\,|\,\hat{a}\hat{a}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|\,n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)\\ \langle n\,|\,\hat{P}^2\,|\,n\rangle &= \frac{m\hbar\omega}{2}\langle n\,|\,\hat{a}\hat{a}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|\,n\rangle = \frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1)\end{aligned}}$$

EXEMPLOS – Oscilador harmónico

$$\boxed{\frac{m\omega^2}{2}\langle n \mid \hat{X}^2 \mid n\rangle = \frac{1}{2m}\langle n \mid \hat{P}^2 \mid n\rangle = \frac{1}{2}\langle n \mid \hat{H} \mid n\rangle.}$$ $\longrightarrow$ **TEOREMA VIRIAL**
O valor médio de T e V são iguais

- **Princípio da incerteza:**

$$\Delta x = \sqrt{\langle \hat{X}^2\rangle - \langle \hat{X}\rangle^2} = \sqrt{\langle \hat{X}^2\rangle} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)}$$
$$\Delta p = \sqrt{\langle \hat{P}^2\rangle - \langle \hat{P}\rangle^2} = \sqrt{\langle \hat{P}^2\rangle} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1)}$$

$\longrightarrow$ $$\boxed{\Delta x\,\Delta p = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar \geq \frac{\hbar}{2}}$$

- **Operadores número (ou número de ocupação) e Hamiltoniano:**

$$\hat{N} = \hat{a}_-\hat{a}_+ \longrightarrow \langle n'|\hat{N} \mid n\rangle = n\delta_{n',n} \longrightarrow \hat{N} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$ (conta o estado)

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2}\right) \longrightarrow \langle n'|\hat{H} \mid n\rangle = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\delta_{n',n} \longrightarrow \hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 3 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 5 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

EXEMPLOS – Sistema a dois níveis

Vamos considerar um sistema cujo Hamiltoniano é, na base de dois estados ortonormais $|\phi_1\rangle$ e $|\phi_2\rangle$ é dado por (α tem dimensões de energia):

$$\hat{H} = \alpha\left(|\phi_1\rangle\langle\phi_2| + |\phi_2\rangle\langle\phi_1|\right)$$

- São $|\phi_1\rangle$ e $|\phi_2\rangle$ estados próprios de $\hat{H}$?

$$\hat{H}|\phi_1\rangle = \alpha\left(|\phi_1\rangle\langle\phi_2| + |\phi_2\rangle\langle\phi_1|\right)|\phi_1\rangle = \alpha\left(|\phi_1\rangle\overbrace{\langle\phi_2|\phi_1\rangle}^{=0} + |\phi_2\rangle\overbrace{\langle\phi_1|\phi_1\rangle}^{=1}\right)$$

$$= \alpha|\phi_2\rangle \longrightarrow$$ $|\phi_1\rangle$ não é estado próprio de energia

$$\hat{H}|\phi_2\rangle = \alpha\left(|\phi_1\rangle\langle\phi_2| + |\phi_2\rangle\langle\phi_1|\right)|\phi_2\rangle = \alpha\left(|\phi_1\rangle\overbrace{\langle\phi_2|\phi_2\rangle}^{=1} + |\phi_2\rangle\overbrace{\langle\phi_1|\phi_2\rangle}^{=0}\right)$$

$$= \alpha|\phi_1\rangle \longrightarrow$$ $|\phi_2\rangle$ não é estado próprio de energia

- Assumindo que $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle\}$ formam uma base completa, determinar os estados próprios de $\hat{H}$ e as energias correspondentes?

Método 1: Se a base é completa os estados próprios podem escrever-se como:

$$|\psi\rangle = \lambda_1|\phi_1\rangle + \lambda_2|\phi_2\rangle \xrightarrow{\text{normalização}} \langle\psi|\psi\rangle = |\lambda_1|^2 + |\lambda_2|^2 = 1$$

$$\hat{H} \mid \psi\rangle = \alpha\,(\mid \phi_1\rangle\langle\phi_2 \mid + \mid \phi_2\rangle\langle\phi_1 \mid)\,(\lambda_1 \mid \phi_1\rangle + \lambda_2 \mid \phi_2\rangle)$$

$$= \alpha\,(\lambda_2 \mid \phi_1\rangle + \lambda_1 \mid \phi_2\rangle) = E \mid \psi\rangle \longrightarrow \mid \lambda_1 \mid = \mid \lambda_2 \mid$$

Temos então que:

$\mid \lambda_1 \mid = \mid \lambda_2 \mid$ e $\mid \lambda_1 \mid^2 + \mid \lambda_2 \mid^2 = 1$

$\mid \lambda_1 \mid = \mid \lambda_2 \mid = 1/\sqrt{2}\,,\ \lambda_1 = \pm\lambda_2$ $\longrightarrow$ $\boxed{\mid \psi_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mid \phi_1\rangle \pm \mid \phi_2\rangle)}$ Estados próprios de energia

Estados próprios de energia: $\hat{H} \mid \psi_\pm\rangle = \pm\alpha \mid \psi_\pm\rangle \longrightarrow E_\pm = \pm\alpha$

Método 2: Representação matricial de $\hat{H}$ na base $\{|\phi_1\rangle\ ,\ |\phi_2\rangle\}$. Elementos de matriz:

$$H_{11} = \langle\phi_1 \mid \hat{H} \mid \phi_1\rangle = 0 \qquad H_{12} = \langle\phi_1 \mid \hat{H} \mid \phi_2\rangle = \alpha$$

$$H_{22} = \langle\phi_2 \mid \hat{H} \mid \phi_2\rangle = 0 \qquad H_{21} = \langle\phi_2 \mid \hat{H} \mid \phi_1\rangle = \alpha$$

$$\longrightarrow H = \alpha \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Vetores próprios: $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \longrightarrow \mid \psi_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mid \phi_1\rangle \pm \mid \phi_2\rangle)$ Valores próprios: $\pm\alpha$

RELAÇÕES DE INCERTEZA ENTRE DOIS OPERADORES

Consideremos dois operadores hermíticos $\hat{A}$ e $\hat{B}$

- Valores médios em relação a um estado $|\psi\rangle$: $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi \mid \hat{A} \mid \psi \rangle$, $\langle \hat{B} \rangle = \langle \psi \mid \hat{B} \mid \psi \rangle$

- Introduzimos os operadores: $\Delta \hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$, $\Delta \hat{B} = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle$

$$(\Delta \hat{A})^2 = \hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \rangle^2 \qquad \langle \psi \mid (\Delta \hat{A})^2 \mid \psi \rangle = \langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$$

$$(\Delta \hat{B})^2 = \hat{B}^2 - 2\hat{B}\langle \hat{B} \rangle + \langle \hat{B} \rangle^2 \longrightarrow \langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle = \langle \hat{B}^2 \rangle - \langle \hat{B} \rangle^2$$

Definimos as incertezas:

$$\boxed{\Delta A = \sqrt{\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle} = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}, \quad \Delta B = \sqrt{\langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle} = \sqrt{\langle \hat{B}^2 \rangle - \langle \hat{B} \rangle^2}.}$$

- Definimos os estados $|\chi\rangle$ e $|\phi\rangle$:

$$|\chi\rangle = \Delta \hat{A} \mid \psi \rangle = \left(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle\right) \mid \psi \rangle$$

$$|\phi\rangle = \Delta \hat{B} \mid \psi \rangle = \left(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle\right) \mid \psi \rangle$$

$$\xrightarrow[\Delta \hat{B}^\dagger = \Delta \hat{B}]{\Delta \hat{A}^\dagger = \Delta \hat{A}}$$

$$\langle \chi \mid \chi \rangle = \langle \psi \mid (\Delta \hat{A})^2 \mid \psi \rangle$$

$$\langle \chi \mid \phi \rangle = \langle \psi \mid \Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \mid \psi \rangle$$

$$\langle \phi \mid \phi \rangle = \langle \psi \mid (\Delta \hat{B})^2 \mid \psi \rangle$$

RELAÇÕES DE INCERTEZA ENTRE DOIS OPERADORES

- Desigualdade de Schwartz: $\langle\chi \mid \chi\rangle\langle\phi \mid \phi\rangle \geq |\langle\chi \mid \phi\rangle|^2 \longrightarrow \langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle \geq \left|\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle\right|^2$
- Tendo em conta: $\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = \frac{1}{2}[\Delta\hat{A},\ \Delta\hat{B}] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A},\ \Delta\hat{B}\} = \frac{1}{2}[\hat{A},\ \hat{B}] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A},\ \Delta\hat{B}\}$

$$\xrightarrow{\text{Griff. 3.5.1}} \left|\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle\right|^2 = \frac{1}{4}\left|\langle[\hat{A},\ \hat{B}]\rangle\right|^2 + \frac{1}{4}\left|\langle\{\Delta\hat{A},\ \Delta\hat{B}\}\rangle\right|^2$$

PRINCÍPIO DA INCERTEZA GENERALIZADO: $\boxed{\Delta A\,\Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{A},\ \hat{B}]\rangle\right|}$

PRINCÍPIO DA INCERTEZA DE HEISEINBERG: $\Delta x\,\Delta p_x \geq \frac{1}{2}\ |\ \langle[\hat{X},\ \hat{P}_x]\rangle\ |$

Vimos que: $[\hat{X},\ \hat{P}_x] = i\hbar\hat{I} \longrightarrow \Delta x\,\Delta p_x \geq \hbar/2$

Para as restantes componentes:

$$\boxed{\Delta x\,\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2},\quad \Delta y\,\Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2},\ \Delta z\,\Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}.}$$

BASES CONTÍNUAS

BASE DISCRETA $(m, n = 1, 2, 3, 4, \ldots)$		BASE CONTÍNUA (k contínuo)
$\sum_{n=n_0}^{\infty}$	$\longrightarrow$	$\int_{-\infty}^{+\infty} dk$
$\sum_{n=n_0}^{\infty} \mid \phi_n\rangle\langle\phi_n \mid = \hat{I}$	$\longrightarrow$	$\int_{-\infty}^{+\infty} dk \mid \chi_k\rangle\langle\chi_k \mid = \hat{I}$
$\langle\phi_m\|\phi_n\rangle = \delta_{mn}$	$\longrightarrow$	$\langle\chi_k \mid \chi_{k'}\rangle = \delta(k' - k)$
$\|\phi\rangle = \sum_n c_n\|\phi_n\rangle$	$\longrightarrow$	$\mid \psi\rangle = \hat{I} \mid \psi\rangle = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dk \mid \chi_k\rangle\langle\chi_k \mid\right) \mid \psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dk\, b(k) \mid \chi_k\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dk\, b(k) \mid \chi_k\rangle$

$b(k)$ - é uma função da variável contínua k equivalente aos coeficientes de expansão na base discreta

BASES CONTÍNUAS – base das posições

- Representação no espaço das posições. Base: $\{|\vec{r}\rangle\}$

$$\langle \vec{r} \mid \vec{r}\,'\rangle = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \quad = \quad \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z') \longrightarrow \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}$$

- Operador posição (estados próprios): $\hat{\vec{R}} \mid \vec{r}\rangle = \vec{r} \mid \vec{r}\rangle$

- Expansão: $|\psi\rangle = \underbrace{\int d^3 r \mid \vec{r}\rangle\langle \vec{r} \mid}_{=\hat{I}} \psi\rangle \equiv \int d^3 r\, \psi(\vec{r}) \mid \vec{r}\rangle$

$\langle \vec{r} \mid \psi\rangle$ é o coeficiente da expansão na base $\{|\vec{r}\rangle\}$

$\longrightarrow |\langle \vec{r} \mid \psi\rangle|^2\, d^3 r$ Probabilidade de encontrar a partícula numa região do espaço entre $\vec{r}$ e $\vec{r}+d\vec{r}$

$\langle \vec{r} \mid \psi\rangle = \psi(\vec{r})$ **É A FUNÇÃO DE ONDA NO ESPAÇO DAS POSIÇÕES PARA O ESTADO $|\vec{r}\rangle$**

PRODUTO ESCALAR: $\langle \phi \mid \psi\rangle = \langle \phi \mid \left(\int d^3 r \mid \vec{r}\rangle\langle \vec{r} \mid\right) \mid \psi\rangle = \int d^3 r\, \phi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})$

HERMITICIDADE DO OPERADOR POSIÇÃO:

$$\langle \phi \mid \hat{\vec{R}} \mid \psi \rangle = \int d^3r\, \vec{r} \langle \phi \mid \vec{r} \rangle \langle \vec{r} \mid \psi \rangle = \left[\int d^3r\, \vec{r} \langle \psi \mid \vec{r} \rangle \langle \vec{r} \mid \phi \rangle \right]^* = \langle \psi \mid \hat{\vec{R}} \mid \phi \rangle^*$$

- Representação no espaço das posições. Base: $\{\mid \vec{p} \rangle\}$

$$\langle \vec{p} \mid \vec{p}\,' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}\,'), \quad \int \mathrm{d}^3\mathrm{p} \mid \vec{\mathrm{p}} \rangle \langle \vec{\mathrm{p}} \mid = \hat{\mathrm{I}}$$

- Operador momento (estados próprios): $\hat{\vec{P}} \mid \vec{p} \rangle = \vec{p} \mid \vec{p} \rangle$

- Expansão: $\mid \psi \rangle = \int d^3p \mid \vec{p} \rangle \langle \vec{p} \mid \psi \rangle = \int d^3p\, \Psi(\vec{p}) \mid \vec{p} \rangle$

$\longrightarrow \mid \Psi(\vec{p}) \mid^2 d^3p$ Probabilidade de encontrar a partícula numa região do espaço entre $\vec{p}$ e $\vec{p} + d\vec{p}$

$\langle \vec{p} \mid \psi \rangle = \Psi(\vec{p})$ **É A FUNÇÃO DE ONDA NO ESPAÇO DOS MOMENTOS PARA O ESTADO $|\vec{p}\rangle$**

PRODUTO ESCALAR: $\langle \phi \mid \psi \rangle = \langle \phi \mid \left(\int d^3p \mid \vec{p} \rangle \langle \vec{p} \mid \right) \mid \psi \rangle = \int d^3p\, \Phi^*(\vec{p}) \Psi(\vec{p})$

BASES CONTÍNUAS – posições vs momentos

PASSAGEM DE UMA BASE PARA A OUTRA: $\{|\,\vec{r}\rangle\} \xrightarrow[\langle \vec{r}\,|\,\vec{p}\rangle]{} \{|\,\vec{p}\rangle\}$

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} \mid \psi \rangle = \langle \vec{r} \mid \left(\int d^3p \mid \vec{p}\rangle\langle \vec{p} \mid \right) \mid \psi \rangle = \int d^3p \; \langle \vec{r} \mid \vec{p}\rangle \Psi(\vec{p})$$

SABEMOS QUE TEM QUE SER A TRANSFORMADA DE FOURIER

$$\boxed{\langle \vec{r} \mid \vec{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\,\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}.}$$

Esta função transforma do espaço das posições para o espaço dos momentos

$$\boxed{\langle \vec{p} \mid \vec{r}\rangle = \langle \vec{r} \mid \vec{p}\rangle^* = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\,\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}.}$$

Esta função transforma do espaço dos momentos para o espaço das posições

EVOLUÇÃO TEMPORAL: $|\psi(t_0)\rangle \xrightarrow[(t > t_0)]{\hat{U}(t, t_0)} |\psi(t)\rangle$

Operador evolução temporal:

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

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}$$

- **Vamos agora encontrar $\hat{U}(t, t_0)$:**

Aplicamos a eq. de Schrodinger a $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$

$$\longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle\right) = \hat{H}\left(\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle\right) \longrightarrow \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U}(t, t_0)$$

- **Temos então:** $\boxed{\hat{U}(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)\hat{H}/\hbar} \quad , \quad |\psi(t)\rangle = e^{-i(t-t_0)\hat{H}/\hbar}|\psi(t_0)\rangle.}$

- **Exemplo:** Considere-se a base completa dos auto-estados de energia $\{|\phi_n\rangle\}$

$$|\phi, t = 0\rangle = \sum_n c_n|\phi_n\rangle \longrightarrow |\phi, t\rangle = \sum_n c_n e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\phi_n\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar}|\phi_n\rangle$$

Isto já sabíamos… ☺