



## Notas - Mecânica Quântica

---

**Matheus Pereira Coutinho**  
*Instituto de Física da USP*  
[matheus.coutinho9@usp.br](mailto:matheus.coutinho9@usp.br)

---

## Aula 2 - Experimento da Dupla Fenda

---

## Aula 3 - Estados em Mecânica Quântica e Notação de Dirac

### Princípios Básicos

★ A teoria Quântica é uma teoria de informação. Diferentemente da mecânica clássica onde, conhecendo as condições iniciais podemos determinar o movimento de um corpo em instantes futuros através da sua dinâmica, na mecânica quântica toda informação que pode ser extraída de um sistema físico está em um vetor de estado. Para qualquer sistema físico em mecânica quântica existe um vetor de estado que caracteriza esse sistema e nos permite obter todas as informações sobre ele. Frequentemente o vetor de estado é representado por

$$|\psi\rangle$$

★ Observáveis (energia, posição, momento) em mecânica quântica são representados por operadores hermitianos

★ Medir uma grandeza física em mecânica quântica significa que o operador associado ao observável atua sobre o estado do sistema retornando um dos seus possíveis autovalores. O resultado de uma medida sempre é um dos autovalores do operador em questão

★ O valor esperado de um observável cujo operador associado é  $A$  é

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

onde  $|\psi\rangle$  é o estado do sistema

★ o estado físico de um sistema evolui no tempo segundo a equação de Schrodinger

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

### Estado em Mecânica Quântica

O estado de um sistema em mecânica quântica é caracterizado por um objeto matemático abstrato que se relaciona com propriedades observáveis do sistema através de distribuições de probabilidades.

O estado de um sistema pode ser representado de várias formas, uma delas é através da função de onda  $\psi(\vec{x}, t)$ . Porém, uma forma mais abrangente é por meio de um vetor em um espaço de funções complexas e na notação de Dirac  $|\psi\rangle$

O espaço  $\mathcal{H}$  associado pode ter dimensão finita ou infinita e o produto interno entre dois vetores deve ser um número complexo. Na notação de Dirac

$$\langle \psi | \phi \rangle \in \mathbb{C}, \quad \forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$$

Além disso o módulo quadrado de um vetor deve respeitar a condição

$$|\psi|^2 \geq 0 \in \mathbb{R}$$

O espaço deve ser completo, o que quer dizer que a diferença entre dois vetores é sempre finita

$$|\psi - \phi| < \varepsilon \quad \varepsilon \rightarrow 0$$

---

Um vetor nesse espaço pode sempre ser representado em uma base  $|k\rangle$

Todas essas propriedades são característica do chamado do espaço Hilbert  $\mathcal{H}$ , o espaço vetorial típico dos estados quântico

### Produto interno

Dada uma base  $|k\rangle$ , escrevemos um estado como combinação linear dos elementos da base

$$|\psi\rangle = \sum_k \psi_k |k\rangle \quad \langle\psi| = \sum_k \psi_k^* \langle k|$$

E com isso podemos chegar em uma expressão para o produto interno entre dois vetores

$$\begin{aligned} \langle\psi|\phi\rangle &= \sum_k \psi_k^* \langle k| \sum_n \phi_n |n\rangle = \sum_k \sum_n \psi_k^* \phi_n \langle k|n\rangle \\ \langle\psi|\phi\rangle &= \sum_k \psi_k^* \cdot \phi_k \end{aligned}$$

Em notação matricial

$$\begin{aligned} \langle\psi|\phi\rangle &= \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* & \cdots & \psi_n^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_n \end{pmatrix} = \sum_k \psi_k^* \cdot \phi_k \\ \langle\psi|\phi\rangle &= \langle\phi|\psi\rangle^* \end{aligned}$$

Se eu tomar o produto entre um elemento da base e um vetor é possível determinar os coeficientes do estado

$$\langle m|\psi\rangle = \langle m| \sum_k \psi_k |k\rangle = \sum_k \psi_k \langle m|k\rangle = \psi_m$$

A base de estados pode ser representada pelos vetores colunas (supondo um espaço de 3 dimensões)

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Mas podemos fazer uma mudança de base, para tanto, tomemos a identidade como

$$P = \sum_k |k\rangle \langle k| = \mathbb{I}$$

Então dado um vetor  $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_k \psi_k |k\rangle$$

---

Podemos multiplicar pela identidade

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &= \sum_k \psi_k \sum_n |n\rangle \langle n|k\rangle \\
 |\psi\rangle &= \sum_n \left( \sum_k \psi_k \langle n|k\rangle \right) |n\rangle \\
 |\psi\rangle &= \sum_n c_n |n\rangle
 \end{aligned}$$

onde

$$c_n = \sum_k \psi_k \langle n|k\rangle$$

Em mecânica quântica um sistema tem seu estado representado por um vetor  $\psi$  cuja dimensionalidade depende do problema a ser estudado.  $\psi$  pode ser escrito em bases discretas como também bases contínuas.

$$|\psi\rangle = \sum_k \psi_k |k\rangle \rightarrow |\psi\rangle = \int d\xi \psi(\xi) |\xi\rangle$$

Podemos escrever o produto interno

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | \phi \rangle &= \int d\xi \psi^*(\xi) \langle \xi | \int d\zeta \phi(\zeta) |\zeta\rangle = \iint d\xi d\zeta \psi^*(\xi) \phi(\zeta) \langle \xi | \zeta \rangle \\
 \langle \psi | \phi \rangle &= \int d\xi \psi^*(\xi) \phi(\xi)
 \end{aligned}$$

Uma base muito comum é a base de posição

$$|\psi\rangle = \int dx \psi(x) |x\rangle$$

As funções  $\psi(x)$  são as componentes do estado para cada vetor de base  $|x\rangle$ .  $\psi(x)$  é denominada função de onda da partícula ou do sistema.

Do experimento da dupla fenda, identificamos uma função associada à probabilidade de encontrar o elétron em uma posição  $\phi(x)$ . A probabilidade é dada por

$$P(x) = |\phi(x)|^2 dx$$

Para se ter uma interpretação de probabilidade coerente com a noção é necessário que

$$\int |\phi(x)|^2 dx = 1 = \int \phi^*(x) \phi(x) dx = \int \langle \phi | x \rangle \langle x | \phi \rangle dx = 1$$

Como

$$\int dx |x\rangle \langle x| = 1$$

$$\langle \phi | \phi \rangle = 1$$

Ou seja, o vetor de estado deve ser normalizado,

---

## Aula 4 - Operadores e Medida

### Postulados

- Vetor de estado  $\rightarrow$  Ket  $|\rangle$
- Observáveis  $\rightarrow$  operadores hermitianos
- Medir  $\rightarrow$  operador atua sobre um estado retornando um autovalor
- Valor esperado  $\rightarrow \langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$
- Evolução Temporal  $\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$

### Operadores

Atua em um ket pelo lado esquerdo (ou em um bra pelo direito) resultando em outro ket (ou outro bra)

Operador  $\langle \hat{A} \rangle$

$$\hat{A} |\psi\rangle = |\phi\rangle$$

$$\langle \psi | \hat{A} = \langle \phi |$$

Objetos que realizam transformações em vetores de estado

$\hat{A} |\psi\rangle$  ou  $\langle \psi | \hat{A}$  nem sempre resultam em kets ou bras que sejam duais entre eles.

Existe um operador adjunto a  $\hat{A} \rightarrow \hat{A}^\dagger$  de tal forma que o resultado  $|\phi\rangle = \hat{A} |\psi\rangle$  e  $\langle \phi | = \langle \psi | \hat{A}^\dagger$  sejam duais entre eles.

Há um grupo de operadores onde  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger \rightarrow$  operadores hermitianos

### Algumas propriedades de operadores

–

$$\hat{X} + \hat{Y} + \hat{Z} = (\hat{X} + \hat{Y}) + \hat{Z} = \hat{X} + (\hat{Y} + \hat{Z})$$

–

$$\hat{Z} + \hat{Y} + \hat{Z} = \hat{Y} + \hat{X} + \hat{Z} = \hat{Z} + \hat{X} + \hat{Y}$$

–

$$\hat{X}\hat{Y}\hat{Z} = (\hat{X}\hat{Y})\hat{Z} = \hat{X}(\hat{Y}\hat{Z})$$

$$\hat{X}\hat{Y} \neq \hat{Y}\hat{X}$$

–

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Por fim,  $\hat{X}$ ,  $\hat{Y}$  e seus adjuntos  $\hat{X}^\dagger$  e  $\hat{Y}^\dagger$

$$\hat{Y} |\psi\rangle \leftrightarrow \langle \psi | \hat{Y}^\dagger \quad \hat{X} |\psi\rangle \leftrightarrow \langle \psi | \hat{X}^\dagger$$

$$\hat{X}(\hat{Y} |\psi\rangle) = \hat{X} |\phi\rangle = |\psi\rangle$$

$$(\hat{X}\hat{Y}) |\psi\rangle = |\psi\rangle$$

---


$$(\langle \psi | \hat{Y}^\dagger) \hat{X}^\dagger = \langle \phi | \hat{X}^\dagger = \langle \omega |$$

$$\langle \psi | (\hat{Y}^\dagger \hat{X}^\dagger) = \langle \omega | \quad (\hat{X} \hat{Y})^\dagger = \hat{Y}^\dagger \hat{X}^\dagger$$

Operadores são matrizes  $\rightarrow$  existe uma base que uso para representar os vetores de estado  $\Rightarrow |k\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |k\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

$$\langle \psi | = \sum_k \psi_k^* \langle k | \Rightarrow (\psi_1^* \dots \psi_n^*)$$

Um operador  $\hat{X}$  qualquer

$$\begin{aligned} \hat{X}|\psi\rangle &= |\phi\rangle \\ \langle \psi | \hat{X}^\dagger &\Rightarrow \langle \phi | \end{aligned}$$

Operadores são matrizes quadradas de mesma dimensão da base

$$\Lambda = \sum_k |k\rangle \langle k| = 1 \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Seja  $\hat{A}$  um operador

$$\hat{A} = 1 \hat{A} 1 = \sum_k |k\rangle \langle k| \hat{A} \sum_n |n\rangle \langle n|$$

$$\hat{A} = \sum_k \sum_n |k\rangle \langle k| \hat{A} |n\rangle \langle n|$$

$$A_{kn} = \langle k | \hat{A} | n \rangle$$

$$\hat{A} = \sum_k \sum_n A_{kn} |k\rangle \langle n|$$

$$\hat{A}^\dagger = \sum_k \sum_n A_{kn}^* |n\rangle \langle k|$$

$\hat{A}^\dagger \rightarrow$  matriz transposta cujos elementos são os complexos conjugados

### Processo de medida em Mecânica Quântica

medida em mecânica quântica  $\rightarrow$  probabilidades.

Não sei qual será a posição de um elétron individual antes de medi-la. Contudo, se eu realizar muitas medidas independentes posso calcular grandezas estatísticas e estimar valores esperados com base em distribuições de probabilidades.

---

### Valor esperado de uma medida

Observável  $X \rightarrow$  posição no experimento da dupla fenda.

$$\langle x \rangle = \sum_i x_i P_i \quad \sum_i P_i = 1 \quad \Leftarrow \text{discreta}$$

$$\langle x \rangle = \int dx \, x \cdot H(x)$$

$H(x)$  é uma densidade de probabilidade  $\rightarrow H(x) = |\psi(x)|^2$

$$\langle x \rangle = \int dx \cdot |\psi(x)|^2 \Rightarrow \int dx \, \psi^*(x) \cdot \psi(x)$$

De forma geral o valor esperado de um observável cujo operador seja  $\hat{A}$  é dado por  $\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$

$\hat{A} \rightarrow$  posição  $\Rightarrow \hat{X}$

$$|\psi\rangle = \int dx \, \psi(x) |x\rangle$$

$$\Lambda = \int dx |x\rangle \langle x|$$

$$\langle x \rangle = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle$$

$$\langle x \rangle = \langle \psi | \int dx' |x'\rangle \langle x'| \hat{x} \int dx |x\rangle \langle x| \psi \rangle$$

$$\langle x \rangle = \int \int dx' dx \langle \psi | x' \rangle \langle x' | \hat{x} | x \rangle \langle x | \psi \rangle$$

$$\langle x \rangle = \int \int dx' dx \, \psi^*(x) \langle x' | \hat{x} | x \rangle \psi(x)$$

$\langle x' | \hat{x} | x \rangle \rightarrow$  representação do operador  $\hat{x}$  na base  $|x\rangle \Rightarrow x \delta(x' - x)$

$$\langle x \rangle = \int \int dx' dx \, \psi^*(x) \, x \cdot \delta(x' - x) \, \psi(x)$$

$$\langle x \rangle = \int dx \, \psi^*(x) \, x \, \psi(x) \quad \Rightarrow \quad \text{Cálculo do valor médio}$$

Observável  $\rightarrow$  grandeza real  $\langle A \rangle \Rightarrow$  número real  $\langle A \rangle = \langle A \rangle^\dagger$

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = (\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle)^* = \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle = \langle A \rangle$$

$$\langle A \rangle = \langle A \rangle^\dagger \text{ se } \hat{A} = \hat{A}^\dagger$$

Operadores nos quais seu adjunto é igual a ele mesmo são chamados de operadores auto-adjuntos ou operadores hermitianos.



---

## Aula 5 - Operadores e Medida

Observáveis  $\rightarrow$  operadores hermitianos  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger \Rightarrow \langle A \rangle$  reais

Valores esperadores de uma medida  $\rightarrow$  grandezas estatísticas

Dado um estado  $|\psi\rangle$  para o sistema  $\rightarrow \langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$

O que acontece e eu realizo uma medida de um observável repetidas vezes e obtenho o mesmo valor?

distribuição de probabilidade  $\rightarrow$  variância nula

$$\sigma^2 = 0 \Rightarrow \langle \sigma^2 \rangle = 0$$

$$\sigma^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle$$

$$\langle \sigma^2 \rangle = \langle \psi | \hat{\sigma}^2 | \psi \rangle = 0 \Rightarrow \langle \psi | (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle = 0$$

$$\langle \sigma^2 \rangle = \langle \psi | (\hat{A} - \langle A \rangle)^\dagger (\hat{A} - \langle A \rangle) | \psi \rangle = 0$$

$$(\hat{A} - \langle A \rangle) | \psi \rangle = 0$$

Se  $\sigma^2 = 0$  o valor esperado  $\langle \hat{A} \rangle$  é a própria medida do observável  $\Rightarrow$  vou chamar essa medida de  $\alpha$

$$(\hat{A} - \alpha) | \psi \rangle = 0$$

$$\hat{A} | \psi \rangle = \alpha | \psi \rangle$$

A equação acima é uma equação de autovalores para o operador  $\hat{A}$  onde  $\alpha$  são chamados de autovalores do operador e  $|\psi\rangle$  são chamados de autoestados do operador.

Se o sistema estiver em um estado que seja autoestado de um operador  $\hat{A}$  toda vez que realizo uma medida desse observável eu encontro o mesmo resultado  $\alpha$

**Teorema:** autoestados de operadores hermitianos são ortonormais entre si

$$\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | (\hat{A} | \psi_2 \rangle) = \langle \psi_1 | \alpha_2 | \psi_2 \rangle = \alpha_2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

$$\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle = (\langle \psi_1 | \hat{A}^\dagger) | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \alpha_1 | \psi_1 \rangle = \alpha_1 \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle$$

$$\alpha_2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \alpha_1 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \Rightarrow (\alpha_2 - \alpha_1) \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$$

- Quando os autovalores são diferentes  $\alpha_1 \neq \alpha_2$ , nesse caso  $(\alpha_2 - \alpha_1) \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0 \Rightarrow \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$ . Os estados são ortogonais
- Quando  $\alpha_1 = \alpha_2$  e  $|\psi_1\rangle$  e  $|\psi_2\rangle$  são dois estados diferentes, fala-se que os estados são degenerados

---

É possível mostrar que se  $|\psi_1\rangle$  e  $|\psi_2\rangle$  são autoestados de  $A$  com um mesmo autovalor  $\alpha$ , então a combinação de  $|\psi_1\rangle$  e  $|\psi_2\rangle$  também é autoestado de  $A$  com o mesmo autovalor

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$$

$$A|\psi\rangle = c_1 A|\psi_1\rangle + c_2 A|\psi_2\rangle$$

$$A|\psi\rangle = \alpha (c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = \alpha|\psi\rangle$$

É possível encontrar também combinações  $|\psi'\rangle$  e  $|\psi''\rangle$  de  $|\psi_1\rangle$  e  $|\psi_2\rangle$  de modo que  $\langle\psi'|\psi''\rangle = 0$

★ Operadores Hermitianos  $\Rightarrow$  autoestados são ortogonais entre si

### Exemplo:

Seja um observável qualquer representado por um operador  $A$  que possui dois autovalores possíveis  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$ , e cujos autoestados são representados pelos kets  $|1\rangle$  e  $|2\rangle$ . Suponhamos que o sistema entra-se no estado

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}(2|1\rangle + |2\rangle)$$

Questão: Se eu medir  $A$  qual seria o valor esperado para essa medida?

Primeiramente, verifiquemos se o estado está devidamente normalizado, isto é,  $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

$$\langle\psi|\psi\rangle = \frac{1}{5}(2\langle 1| + \langle 2|)(2|1\rangle + |2\rangle) = \frac{1}{5}(4\langle 1|1\rangle + \langle 2|2\rangle + 2\langle 1|2\rangle + 2\langle 2|1\rangle) = 1$$

Valor Esperado de  $A$

$$\langle A \rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle = \frac{1}{5}[2\langle 1| + \langle 2|] A [2|1\rangle + |2\rangle]$$

$$\langle A \rangle = \frac{1}{5}[4\langle 1|A|1\rangle + \langle 2|A|2\rangle + 2\langle 1|A|2\rangle + 2\langle 2|A|1\rangle]$$

$$\langle A \rangle = \frac{1}{5}(4\alpha_1 + \alpha_2)$$

### Valores Esperados vs Resultado de uma medida em MQ

- Valor esperado  $\rightarrow$  variável estatística  $\rightarrow$  valor médio de uma distribuição de probabilidade
- Valor de uma medida  $\rightarrow$  um valor aleatório com base na distribuição de probabilidade
- Observável  $\rightarrow$  operador hermitiano  $\rightarrow$  autoestados podem ser usados como uma base ortonormal
- Sistema físico  $\rightarrow$  representado por um estado  $|\psi\rangle$ ,  $|\psi\rangle$  uma soma dos autoestados do operador que representa o observável que estou considerando

---

Por exemplo, um operador  $A$  com autovalores  $a_k$  e autoestados  $|k\rangle$ , isto é

$$A|k\rangle = a_k|k\rangle$$

Um estado pode ser representado na base  $|k\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |k\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_k \langle k|\psi\rangle |k\rangle$$

Se o estado  $|\psi\rangle$  é normalizado

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \Rightarrow \sum_n c_n^* \langle n| \sum_k c_k |k\rangle = \sum_n \sum_k c_n^* c_k \langle n|k\rangle = \sum_k |c_k|^2 = 1$$

Valor esperado de um observável  $A$  nesse estado

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle\psi|A|\psi\rangle = \sum_n c_n^* \langle n|A \sum_k c_k |k\rangle = \sum_n \sum_k c_n^* c_k \langle n|A|k\rangle = \sum_n \sum_k c_n^* c_k a_k \langle n|k\rangle \\ \langle A \rangle &= \sum_k |c_k|^2 a_k \end{aligned}$$

$|c_k|^2 \Rightarrow$  probabilidade de , ao fazer uma medida de  $A$ , eu obter um valor  $a_k$

**Medir em Mecânica Quântica** consiste em obter um dos possíveis autovalores de um observável com probabilidade dada pelo coeficiente  $|c_k|^2 = |\langle k|\psi\rangle|^2$

Após o processo de medida o estado  $|\psi\rangle$  é projetado no autoestado selecionado por conta do resultado da medida, o que chamado de colapso da função de onda.

---

## Aula 6 - Medidas Simultâneas - Princípio da Incerteza - posição e momento

### Medir/Observar duas grandezas simultaneamente

Vamos considerar dois operadores hermitianos  $\rightarrow$  dois observáveis  $A, B$

Autoestados e autovalores dados pelas equações

$$A|a_k\rangle = a_k|a_k\rangle$$

$$B|b_k\rangle = b_k|b_k\rangle$$

O que acontece se tento medir  $A$  e  $B$  em um estado qualquer  $|\psi\rangle$  ?

Valores esperados

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

$$\langle B \rangle = \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle$$

Variâncias

$$\sigma_A^2 = \langle (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \rangle$$

$$\sigma_B^2 = \langle (\hat{B} - \langle B \rangle)^2 \rangle$$

Logo

$$\sigma_A^2 = \langle \psi | (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle \psi | (\hat{A} - \langle A \rangle)^\dagger (\hat{A} - \langle A \rangle) | \psi \rangle$$

$$\sigma_B^2 = \langle \psi | (\hat{B} - \langle B \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle \psi | (\hat{B} - \langle B \rangle)^\dagger (\hat{B} - \langle B \rangle) | \psi \rangle$$

Definimos os estados  $|\xi\rangle$  e  $|\zeta\rangle$  como

$$|\xi\rangle = (\hat{A} - \langle A \rangle)|\psi\rangle$$

$$|\zeta\rangle = (\hat{B} - \langle B \rangle)|\psi\rangle$$

Assim

$$\sigma_A^2 = \langle \xi | \xi \rangle$$

$$\sigma_B^2 = \langle \zeta | \zeta \rangle$$

Vamos calcular o produto

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 = \langle \xi | \xi \rangle \langle \zeta | \zeta \rangle$$

Pela Desigualdade de Cauchy-Schwarz

---


$$\langle \xi | \xi \rangle \langle \zeta | \zeta \rangle \geq |\langle \xi | \zeta \rangle|^2$$

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq |\langle \xi | \zeta \rangle|^2 \geq |\langle \psi | (\hat{A} - \langle A \rangle)^\dagger (\hat{B} - \langle B \rangle) | \psi \rangle|^2$$

A e B são hermitianos

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq |\langle \psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) (\hat{B} - \langle B \rangle) | \psi \rangle|^2$$

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq |\langle \psi | AB - \langle B \rangle A - \langle A \rangle B + \langle A \rangle \langle B \rangle | \psi \rangle|^2$$

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq |\langle \psi | \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle | \psi \rangle|^2$$

AB não necessariamente é hermitiano, e portanto  $\langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$  é um número complexo  $z$

$$|z|^2 = \text{Re}[z]^2 + \text{Im}[z]^2$$

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq |z|^2 \geq \text{Im}[z]^2$$

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \text{Im}[z]^2$$

$$\text{Im}[z] = \frac{1}{2i}(z - z^*)$$

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left| \frac{1}{2i} (\langle \hat{A} \hat{B} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle - \langle \hat{B} \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle) \right|^2 \geq \left| \frac{1}{2i} (\langle \hat{A} \hat{B} \rangle - \langle \hat{B} \hat{A} \rangle) \right|^2$$

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left| \frac{1}{2i} (\langle \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} \rangle) \right|^2$$

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left| \frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|^2$$

$$\sigma_A \sigma_B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|$$

Se  $[A, B] = 0$  então os autoestados de A são autoestados de B

$$[\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle = 0 \Rightarrow (AB - BA)|\psi\rangle = 0 \Rightarrow AB|\psi\rangle = BA|\psi\rangle$$

Vamos dizer que  $|\psi\rangle$  é um autoestado de A ,  $|\psi\rangle = |a_k\rangle$

$$AB|a_k\rangle = BA|a_k\rangle \Rightarrow AB|a_k\rangle = Ba_k|a_k\rangle = a_k B|a_k\rangle$$

$$A(B|a_k\rangle) = a_k(B|a_k\rangle)$$

$B|a_k\rangle$  deve retornar um número multiplicado por  $|a_k\rangle$  , ou seja,  $|a_k\rangle$  também é autoestado de B

Se  $[A, B] = 0$  existem autoestados simultâneos de A e B.

---

### Exemplo: posição e momento

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \neq 0$$

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle| \geq \frac{1}{2} \hbar$$

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Não é possível medir simultaneamente a posição e momento com precisão infinita. Isso porque não existem estados que sejam, simultaneamente, autoestados de momento e posição

No experimento da dupla fenda os elétrons são lançados com momento bem definido e portanto não possuem um estado de posição, pois não existem estados de posição e momento simultâneos. Ao medir a posição do elétron, para identificar por qual fenda ele passou, o estado colapsa para um autoestado de posição, com isso ele deixa de ser um autoestado de momento, passando a possuir um estado de momento indefinido e perdemos o padrão de interferência no anteparo.

### Autoestados de Posição

$$\hat{x} |x'\rangle = x' |x'\rangle$$

$$\langle x' | x' \rangle = 1$$

$$\langle x' | x'' \rangle = \delta(x' - x'')$$

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle x' | \hat{x} | x' \rangle = x' \langle x' | x' \rangle = x'$$

$$|\psi\rangle = \sum_k \psi_k |a_k\rangle \longrightarrow |\psi\rangle = \int dx' \psi(x') |x'\rangle$$

$$\langle x | \psi \rangle = \int dx' \psi(x') \langle x | x' \rangle = \int dx' \psi(x') \delta(x - x') = \psi(x)$$

Autoestados de momento na representação da base de posição

$$\hat{p} |p\rangle = p' |p'\rangle$$

$$\langle p' | p' \rangle = 1$$

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

$$|p\rangle = \int dx' \psi_p(x') |x'\rangle$$

$$\mathbb{1} \hat{p} \mathbb{1} |p\rangle = \mathbb{1} p' \mathbb{1} |p'\rangle$$

$$\mathbb{1} = \int dx |x\rangle \langle x|$$

$$\begin{aligned} \int dx'' |x''\rangle \langle x''| \hat{p} \int dx' |x'\rangle \langle x'| p\rangle &= p \int dx'' |x''\rangle \langle x''| \int dx' |x'\rangle \langle x'| p\rangle \\ \int \int dx'' dx' |x''\rangle \langle x''| \hat{p} |x'\rangle \psi_p(x') &= p \int \int dx'' dx' |x''\rangle \langle x''| x'\rangle \psi_p(x') \\ \int \int dx'' dx' |x''\rangle \langle x''| \hat{p} |x'\rangle \psi_p(x') &= p \int dx' \psi_p(x') |x'\rangle \end{aligned}$$

Para calcular  $\langle x'' | \hat{p} | x' \rangle$  vamos primeiro calcular  $\langle x'' | [\hat{x}, \hat{p}] | x' \rangle$

$$\langle x'' | [\hat{x}, \hat{p}] | x' \rangle = \langle x'' | \hat{x} \hat{p} - \hat{p} \hat{x} | x' \rangle = \langle x'' | i\hbar | x' \rangle = i\hbar \langle x'' | x' \rangle = i\hbar \delta(x'' - x')$$

$$\langle x'' | \hat{x} \hat{p} - \hat{p} \hat{x} | x' \rangle = \langle x'' | \hat{x} \hat{p} | x' \rangle - \langle x'' | \hat{p} \hat{x} | x' \rangle = i\hbar \delta(x'' - x')$$

$$x'' \langle x' | \hat{p} | x' \rangle - x' \langle x'' | \hat{p} | x' \rangle = i\hbar \delta(x' - x')$$

$$\langle x'' | \hat{p} | x' \rangle = i\hbar \frac{\delta(x'' - x')}{x'' - x'}$$

Usando a identidade da função delta

$$\frac{d}{dx'} \delta(x') = -\frac{\delta(x')}{x'}$$

$$\langle x'' | \hat{p} | x' \rangle = -i\hbar \frac{d}{dx} \delta(x' - x')$$

Agora é possível substituir o resultado encontrado na equação

$$\begin{aligned} \int \int dx'' dx' |x''\rangle \langle x'' | \hat{p} | x' \rangle \psi_p(x') &= p \int dx' \psi_p(x') |x'\rangle \\ \int \int dx'' dx' |x''\rangle (-i\hbar) \frac{d}{dx} \delta(x'' - x') \psi_p(x') &= p \int dx' \psi_p(x') |x'\rangle \\ \int dx' (-i\hbar) \frac{d}{dx'} \psi_p(x') |x'\rangle &= \int dx' p \psi_p(x') |x'\rangle \end{aligned}$$

Portanto,  $\psi_p(x')$  obedece a equação

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \psi_p(x') = p \psi_p(x')$$

Cuja solução é uma onda plana

$$\psi_p(x) = A e^{i \frac{p}{\hbar} x}$$

$$|p\rangle = \int dx' \psi_p(x') |x'\rangle$$

$$|p\rangle = A \int dx' e^{i \frac{p}{\hbar} x} |x'\rangle$$

---

Como  $\psi_p(x')$  é uma função periódica  $\psi_p(x + \lambda) = \psi_p(x)$

$$A \cdot \exp \left[ i \frac{p}{\hbar} (x + \lambda) \right] = A \cdot \exp \left( i \frac{p}{\hbar} x \right) \Rightarrow \exp \left( i \frac{p}{\hbar} \lambda \right) = 1$$

$$e^{ix} = \cos x + i \sin x$$

$$e^{2i\pi x} = 1$$

$$\frac{p}{\hbar} \lambda = 2\pi$$

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$$

Relação de De Broglie

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

ou

$$p = \hbar k$$

Qual a probabilidade de encontrar uma partícula com momento bem definido entre  $x + dx$ ?

$$P(x, x + dx) = |\psi(x)|^2 dx$$

$$|\psi\rangle = |p\rangle \Rightarrow \psi(x) = \psi_p(x)$$

$$P(x + dx) = |A|^2 \cdot \exp \left( -i \frac{p}{\hbar} x \right) \exp \left( i \frac{p}{\hbar} x \right) dx$$

$$P(x + dx) = |A|^2 dx = \text{constante}$$

Se o momento é definido eu não sei a localização da partícula



---

## Aula 7 - Evolução temporal de estados - Representação de Schrodinger

Como um estado  $|\psi(t_0)\rangle$  evolui para  $|\psi(t)\rangle$ ?

Há um operador  $\mathcal{U}(t, t_0)$  que transforma o estado  $|\psi(t_0)\rangle$  em  $|\psi(t)\rangle$

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

$|\psi(t_0)\rangle$  pode ser representado em uma base qualquer  $|i\rangle$  ortonormal

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_i c_i(t_0) |i\rangle$$

Em  $t > t_0$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i c_i(t) |i\rangle$$

$$|c_i(t)| \neq |c_i(t_0)|$$

Conservação de probabilidades

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = 1$$

$$\sum_i |c_i(t)|^2 = \sum_i |c_i(t_0)|^2$$

Como

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

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) \mathcal{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle$$

$$\mathcal{U}^\dagger(t, t_0) \mathcal{U}(t, t_0) = \mathbb{1} \Rightarrow \text{O operador } \mathcal{U}(t, t_0) \text{ é unitário}$$

Transformações Sucessivas

$$|\psi(t_0)\rangle \rightarrow |\psi(t_1)\rangle \rightarrow |\psi(t_2)\rangle \rightarrow \dots |\psi(t_n)\rangle$$

$$t_n > t_{n-1} > \dots > t_2 > t_1 > t_0$$

$$|\psi(t_n)\rangle = \mathcal{U}(t_n, t_{n-1}) |\psi(t_{n-1})\rangle = \mathcal{U}(t_n, t_{n-1}) \mathcal{U}(t_{n-1}, t_{n-2}) \dots \mathcal{U}(t_2, t_1) \mathcal{U}(t_1, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

$$|\psi(t_n)\rangle = \mathcal{U}(t_n, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

$$\mathcal{U}(t_n, t_0) = \mathcal{U}(t_n, t_{n-1}) \mathcal{U}(t_{n-1}, t_{n-2}) \dots \mathcal{U}(t_1, t_0)$$

Transformações infinitesimais

---


$$\lim_{dt \rightarrow 0} |\psi(t_0 + dt)\rangle = |\psi(t_0)\rangle$$

$$|\psi(t_0 + dt)\rangle = \mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

$$\lim_{dt \rightarrow 0} \mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = 1$$

$\mathcal{U}$  pode ser escrito como

$$\mathcal{U}(t_0 + dt; t_0) = 1 - i\Omega dt$$

$\Omega$  é um operador hermitiano

$$\mathcal{U}(t, t_0) = (1 - i\Omega dt)(1 - i\Omega dt)(1 - i\Omega dt) = 1 - i\Omega(dt + dt + dt)$$

$$\mathcal{U}(t, t_0) = 1 - i\Omega(3dt)$$

$\Omega$  deve ter unidade de frequência  $\omega = \frac{E}{\hbar}$

$$\Omega = \frac{E}{\hbar}$$

$$\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 - i\frac{\hat{H}}{\hbar} dt$$

$$\mathcal{U}(t + dt, t_0) = \mathcal{U}(t + dt, t) \mathcal{U}(t, t_0) = \left(1 - i\frac{\hat{H}}{\hbar} dt\right) \mathcal{U}(t, t_0)$$

$$\mathcal{U}(t + dt, t_0) = \mathcal{U}(t, t_0) - i\frac{\hat{H}}{\hbar} dt \mathcal{U}(t, t_0)$$

$$\mathcal{U}(t + dt, t_0) - \mathcal{U}(t, t_0) = -i\frac{\hat{H}}{\hbar} dt \mathcal{U}(t, t_0)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = \hat{H} \mathcal{U}(t, t_0)$$

Se aplico em  $|\psi(t_0)\rangle$

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

A equação acima é conhecida como Equação de Schrodinger dependente do tempo.

Se  $H$  não depende explicitamente do tempo.

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle$$

$$\mathcal{U}(t, t_0) = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)}$$

---

### Evolução Temporal de valores esperados

Seja A um observável qualquer representado pelo operador  $\hat{A}$

O valor esperado de  $\hat{A}$  em um instante de tempo t é

$$\langle A \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{d}{dt} [\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle] = \left( \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi(t) | \right) \hat{A} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \left( \frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \right) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{A} \left( \frac{\partial}{\partial t} | \psi(t) \rangle \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} | \psi(t) \rangle = -i \hat{H} | \psi(t) \rangle \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi(t) | = i \frac{\hat{H}^\dagger}{\hbar} \langle \psi(t) | = i \frac{\hat{H}}{\hbar} \langle \psi(t) |$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \hat{H} \hat{A} | \psi(t) \rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \right\rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \hat{A} \hat{H} | \psi(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H} | \psi(t) \rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \right\rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \right\rangle$$

Se o operador A não depende explicitamente do tempo

$$\frac{\partial}{\partial t} A = 0$$

Então

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle$$

Se  $[H, A] = 0$  então o observável em questão é contante do movimento

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle &= 0 \\ \langle A \rangle &= \text{constante} \end{aligned}$$

---

## Aula 8 - Relação de incerteza entre energia e tempo

Diferentemente da relação de incerteza entre posição e momento

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

O tempo não é um operador, mas sim um parâmetro externo, e, por isso, a interpretação da incerteza energia-tempo é diferente

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Suponhamos que  $H$  não depende explicitamente do tempo, que possua autoestado  $|n\rangle$  associados a energias  $E_n$ , de acordo com a equação

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle$$

Suponhamos, também, que exista um outro observável qualquer, cujo operador associado é  $A$ , que não depende do tempo, e seus autoestados respeitam a equação

$$A|a_k\rangle = a_k|a_k\rangle$$

O estado do sistema é dado por  $|\psi(t)\rangle$ , e evolui no tempo segundo a equação de Schrodinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

As variâncias de  $H$  e  $A$  estão relacionadas através da relação

$$\sigma_H \sigma_A \geq \left| \frac{1}{2i} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle \right|$$

onde

$$\langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle = \langle \psi(t) | [\hat{H}, \hat{A}] | \psi(t) \rangle$$

O estado do sistema pode ser tanto como combinação dos autoestados de  $H$ , como de  $A$

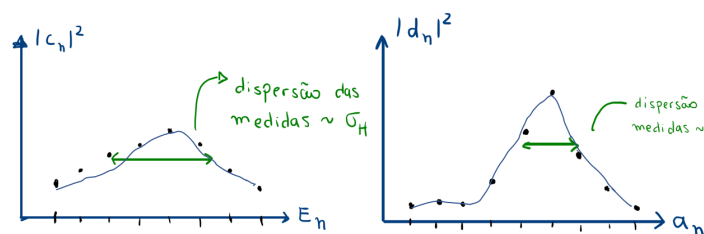
$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n d_n(t) |a_n\rangle$$

$|c_n(t)|^2 \Rightarrow$  probabilidade de encontrar  $|\psi(t)\rangle$  no autoestado  $|n\rangle$ , probabilidade de, se eu medir a energia, encontrar o valor  $E_n$

$|d_n(t)|^2 \Rightarrow$  probabilidade de encontrar  $|\psi(t)\rangle$  no autoestado  $|a_n\rangle$ , probabilidade de, se eu medir  $A$ , encontrar o valor  $a_n$

Podemos representar as probabilidades graficamente



---


$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle \Rightarrow \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dt} \langle A \rangle$$

Logo

$$\sigma_H \sigma_A \geq \left| \frac{1}{2i} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right| \Rightarrow \sigma_H \sigma_A \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right|$$

$$\sigma_H \left( \frac{\sigma_A}{\left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right|} \right) \geq \frac{\hbar}{2}$$

$\sigma_H \rightarrow \Delta E$

$\frac{\sigma_A}{\left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right|} \Rightarrow \text{dimensão de tempo} \Rightarrow \Delta t$

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

A interpretação é que se a dispersão da energia for pequena, então um observável demora muito para mudar seu valor esperado, se a dispersão de energia for grande, então o valor esperado de qualquer observável muda rapidamente.  $\Delta t$  não tem a ver com medida de tempo, mas sim com a estabilidade do sistema físico.

Consideremos o valor esperado do observável  $A$

$$\langle A \rangle = \langle A \rangle(t) = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$$

e o estado do sistema evolui seguindo a equação

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle$$

O estado no instante inicial pode ser escrito na base de energia

$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_n c_n(t=0) |n\rangle$$

Logo

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t=0) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} |n\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t=0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} |n\rangle$$

$$\langle A \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \sum_k c_k^* e^{\frac{i}{\hbar} E_k(t-t_0)} \langle k | \hat{A} \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} |n\rangle$$

$$\langle A \rangle = \sum_k \sum_n c_k^*(t_0) c_n(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_k)(t-t_0)} \langle k | \hat{A} | n \rangle$$

---

## Aula 9 - Representação de Heisenberg

O estado  $\rightarrow |\psi\rangle \Rightarrow$  fixo no tempo  $|\psi(t)\rangle = |\psi(t_0)\rangle = |\psi\rangle$

Operadores evoluem no tempo

Representação de Schrodinger  $\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$

Representação de Heisenberg  $\rightarrow |\psi\rangle \Rightarrow$  fixo no tempo

Operadores variam  $\Rightarrow$  equação que descreve como eles variam

Vamos chamar, dado um observável  $A$  qualquer

Na representação de Schrodinger  $\Rightarrow \hat{A}^{(S)}$

Na representação de Heisenberg  $\Rightarrow \hat{A}^{(H)}$

Existe um operador  $U(\hat{t}, t_0) \Rightarrow$  transformação no estado do instante  $t_0 \rightarrow t$   
Evolução temporal

Disemos que  $\hat{A}^{(H)} = \hat{U}^\dagger(t) \cdot \hat{A} \cdot \hat{U}(t)$

As duas representações são equivalentes?

$\rightarrow$  Se os valores esperados para o observável  $A$  são equivalentes nas duas representações

Vetor de estado no instante  $t_0 = 0 \Rightarrow |\psi\rangle$

Observável  $A \Rightarrow$  operador  $\hat{A}^{(H)}$

Valor esperado de  $A$

$$\langle \hat{A}^{(H)} \rangle = \langle \psi | \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t) | \psi \rangle$$

$$\langle \hat{A}^{(H)} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \langle \hat{A}^{(S)} \rangle \Rightarrow \text{Os mesmo resultados para valores esperados!}$$

Como os operadores evoluem no tempo na representação de Heisenberg?

Seja um operador  $\hat{A}^{(S)} = \hat{A}$  na representação de Schrodinger que não depende explicitamente do tempo

$$\hat{A}^{(H)} = \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t)$$

Vamos calcular

$$\frac{d}{dt} \hat{A}^{(H)} = \frac{d}{dt} (\hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t)) = \left( \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}^\dagger(t) \right) \hat{A} \hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t) \left( \frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \right) \hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \left( \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) \right)$$

---


$$\frac{d}{dt} \hat{A}^{(H)} = \frac{d}{dt} (\hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t)) = \left( \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}^\dagger(t) \right) \hat{A} \hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \left( \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) \right)$$

Lembrando que  $\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U}(t)$

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}^\dagger(t) = \frac{i}{\hbar} \hat{U}^\dagger(t) \hat{H}^\dagger$$

$$\frac{d}{dt} \hat{A}^{(H)} = \frac{i}{\hbar} (\hat{U}^\dagger(t) \hat{H}^\dagger \hat{A} \hat{U}(t) - \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{H} \hat{U}(t))$$

$$\hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t) = 1$$

$$\hat{A}^\dagger = \hat{H}$$

$$\frac{d}{dt} \hat{A}^{(H)} = \frac{i}{\hbar} (\hat{U}^\dagger(t) \hat{H} \hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t) - \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t) \hat{H} \hat{U}(t))$$

$$\frac{d}{dt} \hat{A}^{(H)} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}^{(H)} \hat{A}^{(H)} - \hat{A}^{(H)} \hat{H}^{(H)})$$

$$\frac{d}{dt} \hat{A}^{(H)} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}^{(H)}, \hat{A}^{(H)}] \Rightarrow \text{Equação de movimento do operador } \hat{A}^{(H)}$$

$$|\psi\rangle \Rightarrow \text{fixo}$$

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

$$\hat{A} \Rightarrow \text{fixo}$$

### Postulados da MQ

1 - estado  $|\psi\rangle$

2 - Observável  $\rightarrow$  operadores hermitianos

3 - Processo de medida  $\hat{A} |a_i\rangle = a_i |a_i\rangle$

4 - Valores esperados de medidas  $\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$

5 - Evolução Temporal  $\Rightarrow$  Representação de Schrodinger e de Heisenberg

---

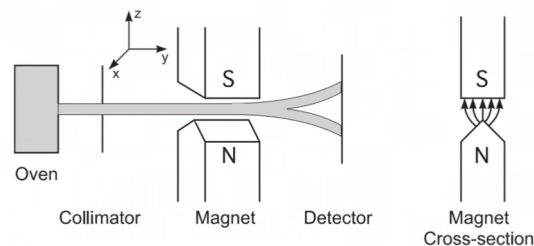
## Aula 10 - O experimento de Stern-Gerlach (1922)

Movimento de átomos neutros em campos magnético não-uniforme

Como os átomos são neutro, espera-se que os campos magnético não acarretem muitas mudanças em suas trajetórias

A não uniformidade do campo magnético é essencial para o aparecimento de uma força devida a um eventual momento de dipolo magnético do átomo. A existência do momento de dipolo magnético do átomo junto com um campo magnético não uniforme é que causarão os desvios nas trajetórias dos átomos

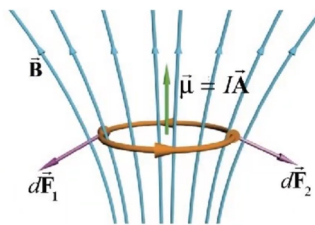
Um esquema do arranjo experimental pode ser visto abaixo



Em geral, utiliza-se átomos pesados, com apenas um elétron na última camada. No experimento de Stern-Gerlach usasse-se átomos de prata

Para a criação do campo magnético não uniforme é preciso um sistema de ímãs em que a geometria dos polos faz com que surjam linhas de campo não uniforme

Esse arranjo gera uma situação em que o momento de dipolo magnético do átomo pode ser visto, classicamente, como uma corrente circulando em uma espira, que sente uma força devido ao campo magnético não uniforme



No caso do experimento de Stern-Gerlach o átomo de prata tem 47 elétrons, mas só 1 na última camada, de forma que podemos considerar o momento de dipolo magnético do átomo como sendo o momento de dipolo magnético de 1 elétron

$$\mu = i \cdot A = \frac{q}{2\pi R} \cdot v \cdot \pi r^2$$

$$\mu = \frac{qrv}{2}$$

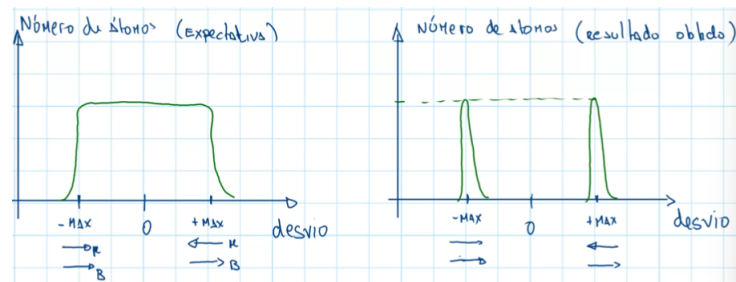
$$L = mrv$$

$$\mu = \frac{q}{2m} L$$



O momento de dipolo magnético do elétron está diretamente relacionado ao momento angular. E a posição do elétron no detetor está associado ao alinhamento do momento angular com o campo magnético

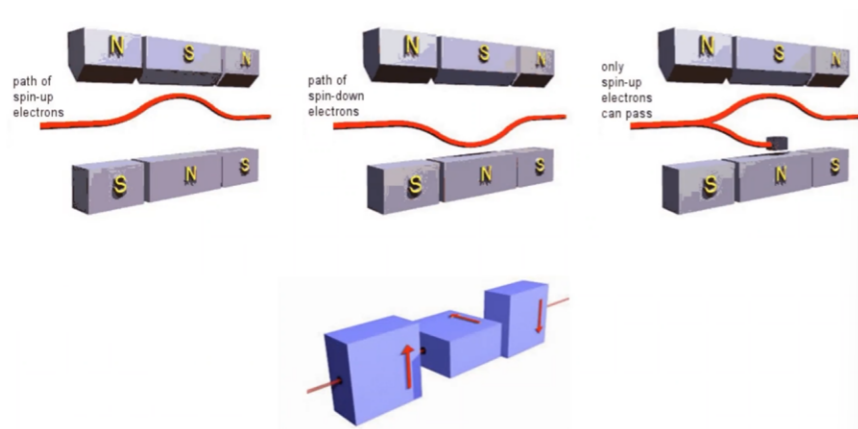
Uma comparação entre o resultado obtido e o esperado está representada no gráficos abaixo



Concluimos com isso que o momento de dipolo magnético do átomo possui apenas duas projeções possíveis no eixo do campo magnético  $\mu_z = \pm\mu$

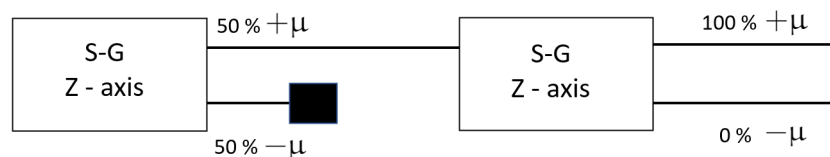
Agora, podemos formular experimentos com polarizados, capazes de selecionar um feixe de partícula com  $\mu_z = +\mu$  ou  $\mu_z = -\mu$

Esse aparato é esquematizado na figura abaixo



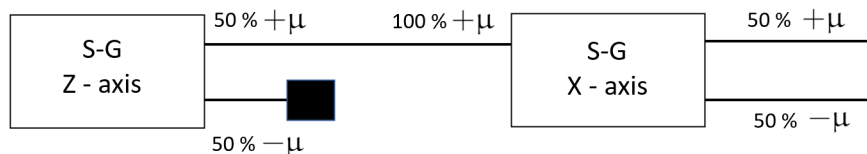
Eu consigo selecionar uma direção bem definida para o vetor  $\mu$ ? É possível determinar simultaneamente as componentes  $\mu_x, \mu_y$  e  $\mu_z$ ?

Consideremos, primeiramente, o experimento em que primeiro bloqueamos os átomos com momento  $-\mu$  e depois medimos novamente os desvios

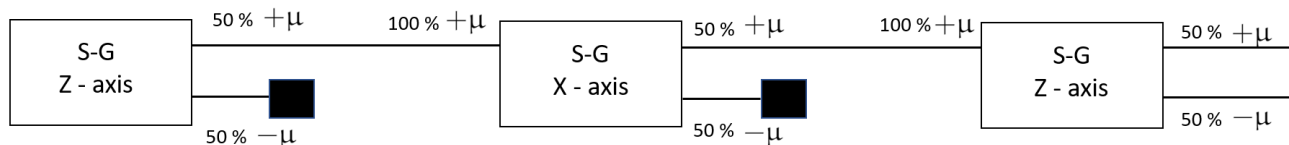


Nenhum resultado inesperado, pois eu selecionei os átomos com momento  $+\mu$  e depois medi 100% dos átomos com momento  $+\mu$ .

Consideremos agora um segundo experimento, em que um feixe de átomos com momento  $+\mu$  é selecionado e em seguida o momento na direção  $x$  é medido



O resultado mostra que se um átomo possui momento bem definido na direção  $z$ , não necessariamente ele terá momento bem definido na direção  $x$ . Mas será que é possível criar um átomo com estado bem definido nas duas direções? Do ponto de vista clássico, eu poderia novamente medir o momento na direção  $z$  e ele deve possuir um feixe com 100% na direção  $+\mu$ , mas, quânticamente, não é isso que ocorre



O que observamos é que um feixe 100% puro na direção  $z$  deixa de ser puro se eu faço uma medida do momento na direção  $x$ , o que é totalmente inesperado.

Do ponto de vista do formalismo quântico, um estado que inicialmente era um autoestado do operador de momento na direção  $z$  não é um autoestado do operador de momento na direção  $x$ , mas, ao fazer uma medida em  $x$ , o sistema colapsou para um autoestado do momento na direção  $x$ , que não é um autoestado de momento na direção  $z$ , e por isso o estado em  $z$  passou a ser indefinido. A medida de uma direção afetou o estado da outra direção.

Portanto, não é possível medir simultaneamente os momentos  $L_x$  e  $L_z$  com precisão infinita. Existe um princípio da incerteza que relaciona as medidas.

Algumas observações

- 3 (ou 4) possíveis observáveis  $L_x, L_y, L_z$  ( $\vec{L}$ )
- Cada um desses observáveis possui somente dois valores possíveis  $L_k \rightarrow +$  ou  $-$
- Não é possível selecionar simultaneamente autoestados de duas dessas componentes

Descrição matemática desse experimento:

Duas possibilidades para cada observável  $\rightarrow$  2 autoestados  $\rightarrow$  2 autovalores

2 dimensões  $\rightarrow$  operadores podem ser representados por matrizes  $2 \times 2$

Base de representação: Escolhemos por convenção os autoestados do operador  $L_z$  com base

Base  $\rightarrow |+\rangle$  e  $|-\rangle$

$$L_z|+\rangle = +1|+\rangle$$

$$L_z|-\rangle = -1|-\rangle$$

---


$$\langle +|+ \rangle = \langle -|- \rangle = 1$$

$$\langle +|- \rangle = 0$$

Observação: a rigor, falta uma unidade de escala, mas estamos ignorando ele por enquanto

Um estado qualquer do sistema pode ser representado nessa base como

$$|\psi\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 = |a|^2 + |b|^2$$

Como podemos expressar, nessa base, os operadores  $L_x$ ,  $L_y$  e  $L_z$

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \longrightarrow \quad |\psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$L_z = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$$

$$L_z|+\rangle = +1|+\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \gamma \end{pmatrix} \Rightarrow \alpha = 1, \quad \gamma = 0$$

$$L_z|-\rangle = -1|-\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta \\ \delta \end{pmatrix} \Rightarrow \beta = 0, \quad \delta = -1$$

Portanto

$$L_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow L_z = |+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -|$$

Para verificar quem é  $L_x$  e  $L_y$ , notemos que o valor esperado de  $L_x$  é zero se o sistema estiver em um dos autoestados  $|+\rangle$  ou  $|-\rangle$ , então uma medida em  $x$  resultará, como já discutido, em 50% dos átomos com momento para cima e 50% para baixo, e assim o valor médio é zero.

$$\langle L_x \rangle = \langle +|L_x|+ \rangle = \langle -|L_x|-\rangle = 0$$

$$\langle +|L_x|+ \rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix} = a = 0$$

$$\langle -|L_x|-\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ d \end{pmatrix} = d = 0$$

O mesmo procedimento pode ser feito para  $L_y$ , de forma que

$$L_x = \begin{pmatrix} 0 & ? \\ ? & 0 \end{pmatrix}, \quad L_y = \begin{pmatrix} 0 & ? \\ ? & 0 \end{pmatrix}$$

---

Agora temos de olhar para as equações de autovalores dos operadores  $L_x$  e  $L_y$ , seus autovalores são, assim como para  $L_z$ ,  $+1$  ou  $-1$ , então

$$L_x |\ell_x\rangle = \pm |\ell_x\rangle$$

$$L_x |\ell_x\rangle = \ell_x |\ell_x\rangle$$

$$\det(L_x - \ell_x \mathbb{1}) = 0$$

$$\det \left[ \begin{pmatrix} 0 & b \\ c & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \ell_x & 0 \\ 0 & \ell_x \end{pmatrix} \right] = 0$$

$$\det \begin{pmatrix} \ell_x & b \\ c & \ell_x \end{pmatrix} = 0$$

$$|\ell_x|^2 - bc = 0 \Rightarrow bc = |\ell_x|^2$$

Como o operador  $L_x$  é hermitiano,  $b^* = c$

$$|b|^2 = |\ell_x|^2$$

Mas como  $\ell_x = \pm 1 \rightarrow |\ell_x|^2 = 1$

$$|b|^2 = 1 = \begin{cases} b = 1 \\ b = i \end{cases}$$

Temos duas soluções possíveis, podemos, livremente, escolher  $b = 1$  para  $L_x$  e  $b = i$  para  $L_y$ . Temos então a representação matricial de  $L_x$  e  $L_y$

$$L_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Na base  $|+\rangle, |-\rangle$  de autoestados do operador  $L_z$

$$L_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad L_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad L_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Essas 3 matrizes são chamadas de matrizes de Pauli  $\sigma_i$ . Mas adiante, também, identificaremos  $L_i$  como operadores de spin  $S_i$ , de forma que

$$S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i$$

---

## Aula 11 - Sistemas de dois níveis

### Ainda sobre o experimento de Stern-Gerlach

Como representar os autoestados de  $L_x$  na base  $|+\rangle, |-\rangle$ ?

$$|+; x\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$|--; x\rangle = c|+\rangle + d|-\rangle = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$$

$$L_x|+; x\rangle = +1|+; x\rangle$$

$$L_x|--; x\rangle = -1|--; x\rangle$$

$$\langle +; x | -; x \rangle = 0$$

$$\langle +; x | +; x \rangle = 1$$

$$\langle -; x | -; x \rangle = 1$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \Rightarrow a = b$$

$$\langle +; x | +; x \rangle = 1 \Rightarrow |a|^2 + |b|^2 = 1 \Rightarrow |a|^2 = |b|^2 = \frac{1}{2}$$

$$|+; x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \Rightarrow c = -d$$

$$\langle -; x | -; x \rangle = 1 \Rightarrow |c|^2 + |d|^2 = 1 \Rightarrow |c|^2 = |d|^2 = \frac{1}{2}$$

$$|--; x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle)$$

Voltando ao experimento de Stern-Gerlach

Se os feixes estão inicialmente em um estado  $|\psi\rangle$ , tal que

$$|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$$

$$\text{Probabilidade de obter } L_z = +1 \Rightarrow P(L_z = +1) = |\langle + | \psi \rangle|^2 = |\alpha|^2 = \frac{1}{2}$$

$$\text{Probabilidade de obter } L_z = -1 \Rightarrow P(L_z = -1) = |\langle - | \psi \rangle|^2 = |\beta|^2 = \frac{1}{2}$$

$|\psi\rangle$  pode ser escrito de várias formas

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle)$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + i|-\rangle)$$

Questão: Qual a probabilidade de medir o momento na direção  $x$  para cima, sabendo que o feixe incidente está no estado  $|\psi\rangle = |+\rangle$

$$P(L_x = +1) = |\langle +; x | \psi \rangle|^2 = |\langle +; x | + \rangle|^2 = \frac{1}{2} = 50\%$$

### Sistemas de dois níveis

observáveis  $\longrightarrow$  dois valores possíveis  $\Rightarrow$  operadores matrizes  $2 \times 2$

Operador qualquer  $A$

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$$

Estados de energia de sistemas de dois níveis  $\Rightarrow$  operador Hamiltoniano

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}$$

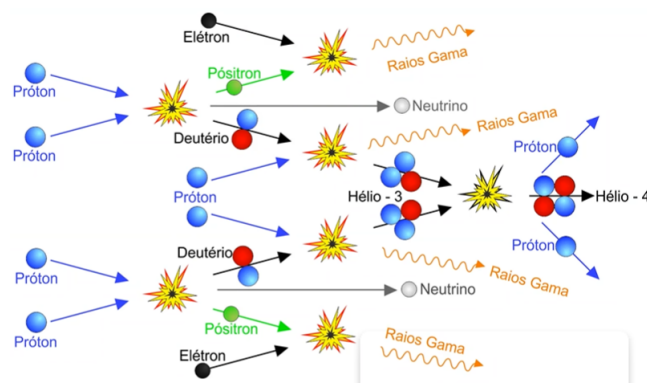
### O problema das oscilações de Neutrinos

Partículas elementares  $\longrightarrow$  3 neutrinos  $\nu_e, \nu_\mu, \nu_\tau$

Neutrino do elétron  $\longrightarrow$  decaimento radioativo  $\beta$

$$p \rightarrow n + e^+ + \nu_e$$

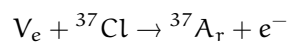
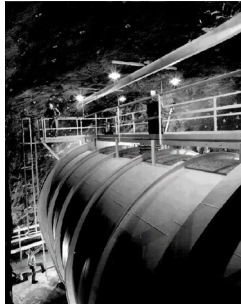
$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$$



---

## Experimentos para medir neutrinos do Sol

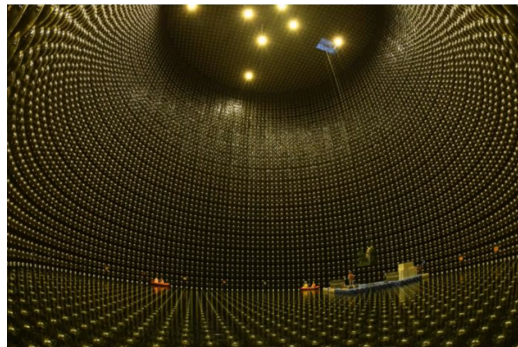
Homestake 1960s



Um átomo de argônio a cada 17 h  $\rightarrow$  1969  $\rightarrow$  1993

Canadá SNO  $\rightarrow$  Sudbury Neutrino Observatory

Japão Super Kamiokandi



Super - K  $\rightarrow \sigma_{\nu_e} + \sigma_{\nu_\mu} + \sigma_{\nu_\tau}$  Compatível com o total de neutrinos esperado

Não há reações nucleares no Sol que produzem neutrinos do múon ou neutrinos do tau. De onde vem esses neutrinos?

Neutrinos do elétron que saem do Sol se transformam em neutrinos do múon ou do tau durante o percurso Sol-Terra

$t = 0$

$$|\psi\rangle \rightarrow 100\% \nu_e$$

$$|\psi\rangle = |\nu_e\rangle$$

$t > 0$

$$|\psi(t \neq 0)\rangle \rightarrow \begin{cases} \text{Prob} & |\nu_e\rangle \\ \text{Prob} & |\nu_\mu\rangle \\ \text{Prob} & |\nu_\tau\rangle \end{cases}$$

$$|\psi(t)\rangle = a|\nu_e\rangle + b|\nu_\mu\rangle + c|\nu_\tau\rangle$$

$$\langle \nu_e | \nu_e \rangle = 1$$

$$\langle \nu_\mu | \nu_\mu \rangle = 1$$

$$\langle \nu_\tau | \nu_\tau \rangle = 1$$

$$\langle \nu_e | \nu_\mu \rangle = 0$$

$$|\psi(t)\rangle \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

3 neutrinos  $\longrightarrow$  3 estados  $\longrightarrow$  sistemas de 3 níveis

Simplificação para apenas dois neutrinos  $\longrightarrow \nu_e$  e  $\nu_\mu$

### Sistema de 2 Neutrinos

Dois estados diferentes  $|\nu_e\rangle, |\nu_\mu\rangle \longrightarrow$  dois níveis

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}$$

Se eu tomar como base os estados  $|\nu_e\rangle, |\nu_\mu\rangle \rightarrow H$  não é diagonal

Os autoestados de  $H$  não são  $|\nu_e\rangle, |\nu_\mu\rangle$

Logo, existe um conjunto de autoestados de  $H$ ,  $|0\rangle, |1\rangle$  de tal forma que  $H$  possa ser representado nessa base como

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_1 \end{pmatrix}$$

$$|\nu_e\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$$

$$|\nu_\mu\rangle = c|0\rangle + d|1\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \alpha(t)|0\rangle + \beta(t)|1\rangle$$

Qual a probabilidade de, em um instante  $t$  qualquer, eu realizar uma medida de energia e obter o valor  $E_0$ ?

$$P(E = E_0) = |\langle 0 | \psi(t) \rangle|^2 = |\alpha(t)|^2$$

Qual a probabilidade de, em um instante  $t$  qualquer, eu medir o tipo de partícula e obter que ela é um neutrino do elétron?

$$P(\nu = \nu_e) = |\langle \nu_e | \psi(t) \rangle|^2 = |a\alpha(t) + b\beta(t)|^2$$



---

## Aula 12 - Evolução temporal de Sistemas de dois níveis

### Problema do oscilação de Neutrinos

Neutrinos mudam ao longo do caminho Sol  $\rightarrow$  terra

#### Evolução temporal

Equação de Shrodinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

Condição inicial  $\rightarrow |\psi(t=0)\rangle = |\nu_e\rangle$

$H \rightarrow$  matriz  $2 \times 2 \rightarrow$  elementos dependem da base escolhida (2 bases interessantes)

1 base  $|\nu_e\rangle, |\nu_\mu\rangle$

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}$$

2 base autoestados de  $H$   $|0\rangle, |1\rangle$

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_1 \end{pmatrix}$$

Seja um estado qualquer  $|\psi(t)\rangle = |\psi\rangle$  na base  $|0\rangle, |1\rangle$

$$|\psi\rangle = \alpha(t)|0\rangle + \beta(t)|1\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \alpha(t) = E_0 \alpha(t) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \beta(t) = E_1 \beta(t) \end{cases}$$

$$|\psi\rangle = \alpha_0 \exp\left(-i \frac{E_0}{\hbar} t\right) |0\rangle + \beta_0 \exp\left(-i \frac{E_1}{\hbar} t\right) |1\rangle$$

Suponhamos que em  $t=0$   $|\psi(t=0)\rangle = |0\rangle$

Qual a probabilidade de, em  $t > 0$  qualquer, encontrar o estado  $|\psi\rangle$  em  $|0\rangle$

$$\text{Prob}(E = E_0) = |\langle 0|\psi\rangle|^2 = |\langle 0|\alpha_0 \exp\left(-i \frac{E_0}{\hbar} t\right) |0\rangle + \beta_0 \exp\left(-i \frac{E_1}{\hbar} t\right) |1\rangle|^2 = |\langle 0|\exp\left(-i \frac{E_0}{\hbar} t\right) |0\rangle|^2 = 1$$

Se mostra que se o estado inicial é autoestado de  $H$ , então a probabilidade dele se manter nesse estado é 100% em qualquer  $t$

---

Se  $|\nu_e\rangle$  e  $|\nu_\mu\rangle$  não são autoestados de H

$$|\nu_e\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$$

$$|\nu_\mu\rangle = c|0\rangle + d|1\rangle$$

A base de estados de neutrinos pode ser pensado como uma rotação em torno da base de autoestados de energia

$$|\nu_e\rangle = \cos \theta |0\rangle + \sin \theta |1\rangle$$

$$|\nu_\mu\rangle = -\sin \theta |0\rangle + \cos \theta |1\rangle$$

Se  $|\psi\rangle$  em  $t = 0$  é um neutrino do elétron  $|\nu_e\rangle \rightarrow |\psi(t=0)\rangle = \cos \theta |0\rangle + \sin \theta |1\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = \cos \theta \exp\left(-i \frac{E_0}{\hbar} t\right) |0\rangle + \sin \theta \exp\left(-i \frac{E_1}{\hbar} t\right) |1\rangle$$

Qual a probabilidade de , em  $t > 0$  qualquer, encontrar um neutrino do elétron ?

$$\text{Prob}(\nu = \nu_e) = |\langle \nu_e | \psi(t) \rangle|^2$$

$$\text{Prob}(\nu = \nu_e) = |\langle \nu_e | \psi \rangle|^2 = |(\cos \theta \langle 0| + \sin \theta \langle 1|) \left( \cos \theta \cdot \exp\left(-i \frac{E_0}{\hbar} t\right) |0\rangle + \sin \theta \cdot \exp\left(-i \frac{E_1}{\hbar} t\right) |1\rangle \right)|^2$$

$$\text{Prob}(\nu = \nu_e) = \left( \cos^2 \theta \cdot \exp\left(\frac{i E_0 t}{\hbar}\right) + \sin^2 \theta \cdot \exp\left(\frac{i E_1 t}{\hbar}\right) \right) \left( \cos^2 \theta \cdot \exp\left(-\frac{i E_0 t}{\hbar}\right) + \sin^2 \theta \cdot \exp\left(-\frac{i E_1 t}{\hbar}\right) \right)$$

$$\text{Prob}(\nu = \nu_e) = \cos^4 \theta + \sin^4 \theta + (\cos \theta \cdot \sin \theta)^2 \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar} (E_0 - E_1) t\right] + (\cos \theta \cdot \sin \theta)^2 \cdot \exp\left[-\frac{i}{\hbar} (E_0 - E_1) t\right]$$

$$\text{Prob}(\nu = \nu_e) = \cos^4 \theta + \sin^4 \theta + 2(\cos \theta \cdot \sin \theta)^2 \cdot \cos\left[\left(\frac{E_0 - E_1}{\hbar}\right) t\right]$$

Qual a probabilidade de , em  $t > 0$  qualquer, encontrar um neutrino do múon ?

$$\text{Prob}(\nu = \nu_\mu) = |\langle \nu_\mu | \psi(t) \rangle|^2$$

$$\text{Prob}(\nu = \nu_\mu) = |\langle \nu_\mu | \psi \rangle|^2 = |(-\sin \theta \langle 0| + \cos \theta \langle 1|) \left( \cos \theta \cdot \exp\left(-i \frac{E_0}{\hbar} t\right) |0\rangle + \sin \theta \cdot \exp\left(-i \frac{E_1}{\hbar} t\right) |1\rangle \right)|^2$$

$$\text{Prob}(\nu = \nu_\mu) = |\langle \nu_\mu | \psi \rangle|^2 = \left( -\cos \theta \cdot \sin \theta \cdot \exp\left(-\frac{i E_0 t}{\hbar}\right) + \cos \theta \cdot \sin \theta \cdot \exp\left(-\frac{i E_1 t}{\hbar}\right) \right)^2$$

$$\text{Prob}(\nu = \nu_\mu) = |\langle \nu_\mu | \psi \rangle|^2 = (\cos \theta \cdot \sin \theta)^2 \cdot \sin^2\left[\left(\frac{E_0 - E_1}{2\hbar}\right) t\right]$$

Se os neutrinos viajam com velocidade próxima a da luz  $v \approx c$

$$t = \frac{x}{c}$$

$$\text{Prob}(\nu = \nu_\mu) = (\cos\theta \cdot \sin\theta)^2 \cdot \sin^2 \left[ \frac{(E_0 - E_1)}{2\hbar c} x \right]$$

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + (pc)^2}$$

$$E_0 = \sqrt{m_0^2 c^4 + (pc)^2}$$

$$E_1 = \sqrt{m_1^2 c^4 + (pc)^2}$$

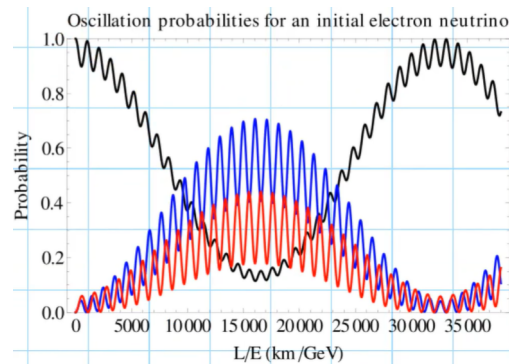
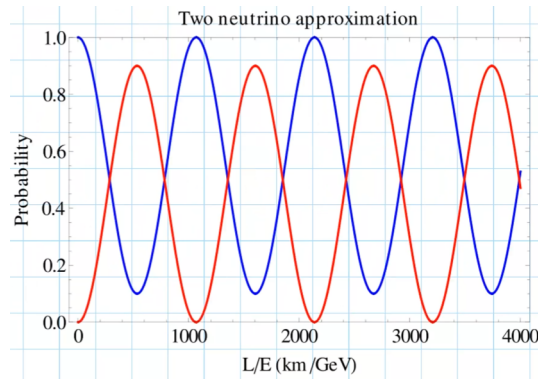
$$E = pc \sqrt{1 + \frac{(m^2 c^4)}{(pc)^2}}$$

$$m \ll p$$

$$E \sim pc \left( 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{mc^2}{pc} \right)^2 + \dots \right)$$

$$\text{Prob}(\nu = \nu_\mu) = (\cos\theta \cdot \sin\theta)^2 \cdot \sin^2 \left[ \frac{(m_0^2 - m_1^2) c^2}{4\hbar c^2 p} x \right]$$

Isso mostra que Neutrinos possuem massa, pois é a diferença de massa que gera a oscilação, observada experimentalmente



---

Como resolver o problema na base  $|\nu_e\rangle, |\nu_\mu\rangle$

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}$$

$$H_{11} = \langle \nu_e | H | \nu_e \rangle$$

$$H_{12} = \langle \nu_\mu | H | \nu_e \rangle$$

$$H_{21} = \langle \nu_e | H | \nu_\mu \rangle$$

$$H_{22} = \langle \nu_\mu | H | \nu_\mu \rangle$$

$$H_{11} = \langle \nu_e | H | \nu_e \rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} = \cos^2 \theta E_0 + \sin^2 \theta E_1$$

$$H_{22} = \langle \nu_\mu | H | \nu_\mu \rangle = \begin{pmatrix} -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} = \sin^2 \theta E_0 + \cos^2 \theta E_1$$

$$H_{12} = H_{21} = \langle \nu_\mu | H | \nu_e \rangle = \begin{pmatrix} -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} = \cos \theta \cdot \sin \theta (E_1 - E_0)$$

$$H = \begin{pmatrix} \cos^2 \theta E_0 + \sin^2 \theta E_1 & \cos \theta \cdot \sin \theta (E_1 - E_0) \\ \cos \theta \cdot \sin \theta (E_1 - E_0) & \sin^2 \theta E_0 + \cos^2 \theta E_1 \end{pmatrix}$$

$$|\psi(t)\rangle = a(t) |\nu_e\rangle + b(t) |\nu_\mu\rangle = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$$

Equação de Schrodinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a(t) = H_{11} a(t) + H_{12} b(t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} b(t) = H_{21} a(t) + H_{22} b(t)$$

Esse é um sistema de equações diferenciais acopladas, que, no fundo, levarão aos mesmos resultados

Isolando, por exemplo,  $b(t)$ , é possível resolver uma equação diferencial de segunda ordem para  $a(t)$

$$b(t) = \frac{i\hbar}{H_{12}} \frac{\partial}{\partial t} a(t) - \frac{H_{11}}{H_{12}} a(t)$$

---


$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{i\hbar}{H_{12}} \frac{\partial}{\partial t} a(t) - \frac{H_{11}}{H_{12}} a(t) \right) = H_{21} a(t) + H_{22} \left( \frac{i\hbar}{H_{12}} \frac{\partial}{\partial t} a(t) - \frac{H_{11}}{H_{12}} a(t) \right)$$

$$A \frac{\partial^2}{\partial t^2} a(t) + B \frac{\partial}{\partial t} a(t) + C a(t) = 0$$

Qual a probabilidade de encontrar a partícula  $v_e$  ?

$$\text{Prob}(v = v_e) = |\langle v_e | \psi \rangle|^2 = |\langle v_e | (a(t)|v_e\rangle + b(t)|v_\mu\rangle)|^2 = |a(t)|^2$$

Qual a probabilidade de encontrar a partícula  $v_\mu$  ?

$$\text{Prob}(v = v_\mu) = |\langle v_\mu | \psi \rangle|^2 = |\langle v_\mu | (a(t)|v_e\rangle + b(t)|v_\mu\rangle)|^2 = |b(t)|^2$$

## Aula 13 - Oscilador Harmônico

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Podemos escrever  $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \rightarrow \hbar\omega(\alpha x - \beta p)(\alpha x + \beta p)$

Classicamente  $\rightarrow \hbar\omega(\alpha^2 x^2 - \beta^2 p^2)$

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \quad \beta = \frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}$$

Mas, em Mecânica Quântica o operador de posição e o operador de momento não comutam

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

$$\hbar\omega(\alpha x - \beta p)(\alpha x + \beta p) = \hbar\omega(\alpha^2 x^2 - \beta^2 p^2 + \alpha\beta(xp - px)) = \hbar\omega(\alpha^2 x^2 - \beta^2 p^2 + \alpha\beta[x, p])$$

$$\hbar\omega(\alpha x - \beta p)(\alpha x + \beta p) = \hbar\omega(\alpha^2 x^2 - \beta^2 p^2) + i\hbar^2\omega\alpha\beta$$

$$\hbar\omega(\alpha x - \beta p)(\alpha x + \beta p) = H + i\hbar^2\omega\alpha\beta = H - \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$H = \hbar\omega(\alpha x - \beta p)(\alpha x + \beta p) + \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$a = \alpha x + \beta p \quad , \quad a^\dagger = \alpha x - \beta p$$

$$H = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)$$

•

$$[a, a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a = (\alpha x + \beta p)(\alpha x - \beta p) - (\alpha x - \beta p)(\alpha x + \beta p)$$

$$[a, a^\dagger] = \alpha^2 x^2 - \beta^2 x^2 + \alpha\beta(px - xp) - \alpha^2 x^2 + \beta^2 p^2 - \alpha\beta(xp - px)$$

$$[a, a^\dagger] = 2\alpha\beta[p, x] = 1$$

$$[a, a^\dagger] = 1$$

•

$$[H, a] = \left[ \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right), a \right] = \hbar\omega[a^\dagger a, a]$$

$$[H, a] = \hbar\omega[a^\dagger[a, a] + [a^\dagger, a]a] = -\hbar\omega a$$

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad [H, a] = -\hbar\omega a \quad [H, a^\dagger] = \hbar\omega a^\dagger \quad H = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)$$

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle$$

---

$|n\rangle$  é o n-ésimo nível

$E_n$  Energia do n-ésimo nível

Função de onda  $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$

Autovalores de H

$$[H, a]|n\rangle = -\hbar\omega a|n\rangle$$

$$(Ha - aH)|n\rangle = Ha|n\rangle - aH|n\rangle = Ha|n\rangle - E_n a|n\rangle = -\hbar\omega a|n\rangle$$

$$H(a|n\rangle) = (E_n - \hbar\omega) (a|n\rangle)$$

Conclusão:  $a|n\rangle$  também é autoestado de H com energia  $(E_n - \hbar\omega)$

$$[H, a](a|n\rangle) \Rightarrow H(a^2|n\rangle) = (E_n - 2\hbar\omega) (a^2|n\rangle)$$

$$H(a^k|n\rangle) = (E_n - k\hbar\omega) (a^k|n\rangle)$$

$a$  é chamado de operador de abaixamento.

$$\hat{H}(a^\dagger|n\rangle) = (E_n + \hbar\omega) (a^\dagger|n\rangle)$$

$a^\dagger$  é chamado de operador de levantamento.

Energia do estado fundamental

Uma transição para um estado de menor energia o do estado fundamental deve ser impossível

$$H|0\rangle = E_0|0\rangle$$

$$\hbar\omega \left( aa^\dagger + \frac{1}{2} \right) |0\rangle = E_0|0\rangle$$

$$aa^\dagger|0\rangle + \frac{\hbar\omega}{2}|0\rangle = E_0|0\rangle$$

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$H(a|1\rangle) = (E_1 - \hbar\omega) |0\rangle \Rightarrow E_1 - \hbar\omega = E_0 \Rightarrow E_1 = E_0 + \hbar\omega$$

$$H(a|2\rangle) = (E_2 - \hbar\omega) |1\rangle \Rightarrow E_2 - \hbar\omega = E_1 = E_0 + \hbar\omega \Rightarrow E_2 = E_0 + 2\hbar\omega$$

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

$$\Delta E_{n \rightarrow n \pm 1} = \pm \hbar\omega$$

Autoestados

---

Valores esperados de H no autoestado n

$$\langle n | \hat{H} | n \rangle = E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

$$\langle n | \hbar\omega \left( a a^\dagger + \frac{1}{2} \right) | n \rangle = \hbar\omega \left( \langle n | a a^\dagger | n \rangle + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

$$\langle n | a a^\dagger | n \rangle = n$$

$$a a^\dagger = N \rightarrow \text{Operador número}$$

$$a | n \rangle \rightarrow | n - 1 \rangle$$

$$a | n \rangle = c_n | n - 1 \rangle$$

$$(n | a a^\dagger | n) = \langle n | a^\dagger . a | n \rangle = |c_n|^2 \langle n - 1 | n - 1 \rangle = |c_n|^2 = n \Rightarrow c_n = \sqrt{n}$$

$$a | n \rangle = \sqrt{n} | n - 1 \rangle$$

Da mesma forma

$$a^\dagger | n \rangle = b_n | n + 1 \rangle$$

$$a^\dagger | n - 1 \rangle = b_{n-1} | n \rangle \Rightarrow a^\dagger \frac{a | n \rangle}{c_n} = b_{n-1} | n \rangle$$

$$\langle n | \frac{a^\dagger a}{c_n} | n \rangle = b_{n-1} \langle n | n \rangle \Rightarrow \frac{n}{\sqrt{n}} = b_{n-1} \Rightarrow b_{n-1} = \sqrt{n} \Rightarrow b_n = \sqrt{n+1}$$

$$a^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1} | n + 1 \rangle$$

$$\langle 0 | 0 \rangle = 1$$

$$| 1 \rangle \Rightarrow a^\dagger | 0 \rangle$$

$$a^\dagger | 0 \rangle = \sqrt{0+1} | 1 \rangle \Rightarrow | 1 \rangle = a^\dagger | 0 \rangle$$

$$a^\dagger | 1 \rangle = \sqrt{1+1} | 2 \rangle \Rightarrow | 2 \rangle = \frac{a^\dagger | 1 \rangle}{\sqrt{2}} = \frac{a^\dagger}{\sqrt{2}} a^\dagger | 0 \rangle = \frac{(a^\dagger)^2}{\sqrt{2}} | 0 \rangle$$

$$a^\dagger | 2 \rangle = \sqrt{2+1} | 3 \rangle \Rightarrow | 3 \rangle = \frac{a^\dagger}{\sqrt{3}} | 2 \rangle = \frac{(a^\dagger)^3}{\sqrt{3.2}} | 0 \rangle$$

$$\text{Conjunto de autoestados} \Rightarrow | n \rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} | 0 \rangle$$



---

## Aula 14 - Mecânica Quântica em 3D

Movimento clássico de uma partícula em 3D (livre)

$$H = \frac{p^2}{2m}$$

$$\vec{p} = m \frac{d\vec{r}}{dt}$$

Coordenadas cartesianas  $\longrightarrow \vec{r} = x \cdot \vec{e}_x + y \cdot \vec{e}_y + z \cdot \vec{e}_z$

Coordenadas cartesianas  $\longrightarrow \vec{r} = r \cdot \vec{e}_r + \theta \cdot \vec{e}_\theta + \varphi \cdot \vec{e}_\varphi$

$$\vec{p} = p_x \cdot \vec{e}_x + p_y \cdot \vec{e}_y + p_z \cdot \vec{e}_z$$

$$H = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$$

Coordenadas esféricas

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \Rightarrow L^2 = (\vec{r} \times \vec{p})^2$$

$$|\vec{a} \times \vec{b}|^2 = |\vec{a}|^2 |\vec{b}|^2 - (\vec{a} \cdot \vec{b})^2$$

$$L^2 = r^2 p^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2 \Rightarrow p^2 = \frac{L^2}{r^2} + \frac{1}{r^2} (\vec{r} \cdot \vec{p})^2$$

$$\vec{r} \cdot \vec{p} = (r \vec{e}_r \cdot \vec{p}) = r (\vec{e}_r \cdot \vec{p}) = r p_r$$

$$p^2 = \frac{L^2}{r^2} + p_r^2$$

$$H = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2}$$

O primeiro termo está associado à aproximações/afastamentos, enquanto o segundo está associado a rotações

### Partícula livre em coordenadas cartesianas

$$H = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$$

$$P_x \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \delta(x' - x)$$

$$\langle x' | p | x \rangle \Rightarrow p_x$$

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle$$

---


$$\mathbb{1}H\mathbb{1}|n\rangle = \mathbb{1}E_n\mathbb{1}|n\rangle$$

$$\mathbb{1} = \int d\vec{x} |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}|$$

$$\mathbb{1}H\mathbb{1}|n\rangle = \mathbb{1}E_n\mathbb{1}|n\rangle \longrightarrow \mathbb{1} = \int d\vec{x}' |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'| H \int d\vec{x} |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| n\rangle = E_n \int d\vec{x}' |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'| \int d\vec{x} |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| n\rangle$$

$$\langle \vec{x}|n\rangle = \psi_n(\vec{x})$$

$$\int \int d\vec{x}' d\vec{x} |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'| H |\vec{x}\rangle \psi_n(\vec{x}) = E_n \int \int d\vec{x}' d\vec{x} |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'| \vec{x}\rangle \psi_n(\vec{x})$$

$$\int d\vec{x} \left( \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi_n(\vec{x}) |\vec{x}\rangle = E_n \int d\vec{x} \psi_n(\vec{x}) |\vec{x}\rangle$$

Equação de Schrodinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_n(\vec{x}) = E_n \psi_n(\vec{x})$$

$$\nabla^2 \psi_n(\vec{x}) = -k^2 \psi_n(\vec{x})$$

$$k^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2}$$

Método da sepração de variáveis

$$\psi_n(\vec{x}) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi_n(\vec{x}) = \psi_n(x) \psi_n(y) \psi_n(z)$$

$$\nabla^2 \psi_n(\vec{x}) = \psi_y \psi_z \frac{\partial^2 \psi_x}{\partial x^2} + \psi_x \psi_z \frac{\partial^2 \psi_y}{\partial y^2} + \psi_x \psi_y \frac{\partial^2 \psi_z}{\partial z^2} = -k^2 \psi_x \psi_y \psi_z$$

$$\frac{1}{\psi_x} \frac{\partial^2 \psi_x}{\partial x^2} + \frac{1}{\psi_y} \frac{\partial^2 \psi_y}{\partial y^2} + \frac{1}{\psi_z} \frac{\partial^2 \psi_z}{\partial z^2} = -k^2$$

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2$$

$$\frac{1}{\psi_x} \frac{\partial^2 \psi_x}{\partial x^2} = -k_x^2 \quad (\text{o mesmo para os outros termos})$$

$$\frac{\partial^2 \psi_x}{\partial x^2} = -k_x^2 \psi_x$$

$$\psi_x(x) = A_x \cdot e^{ik_x x} + B_x \cdot e^{-ik_x x}$$

$$\psi_n(\vec{x}) = \psi_x \psi_y \psi_z = A \cdot e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} + B \cdot e^{-ik_x x} e^{-ik_y y} e^{-ik_z z}$$

$$\psi_n(\vec{x}) = A \cdot e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} + B \cdot e^{-i(k_x x + k_y y + k_z z)}$$

---


$$\psi_n(\vec{x}) = A \cdot e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + B \cdot e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

$$\vec{k} = k_x \cdot e_x + k_y \cdot e_y + k_z \cdot e_z$$

$$\vec{r} = x \cdot e_x + y \cdot e_y + z \cdot e_z$$

$\psi_n(\vec{x}) \longrightarrow$  superposição de ondas planas, com vetores de onda  $\vec{k}$  e  $-\vec{k}$

### Autoestados de Momento

$$\hat{p} |\psi_p\rangle = p |\psi_p\rangle$$

$$-i\hbar \vec{\nabla} \psi_p(\vec{x}) = p \psi_p(\vec{x})$$

$$\psi_p(\vec{x}) = \psi_{px}(x) \psi_{py}(y) \psi_{pz}(z)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_{px} = p_x \psi_{px}$$

### Solução

$$\psi_{px}(x) = A_{px} \exp \left[ -i \frac{p_x x}{\hbar} \right]$$

$$\psi_p(\vec{x}) = A \exp \left( -i \frac{p_x x}{\hbar} \right) \exp \left( -i \frac{p_y y}{\hbar} \right) \exp \left( -i \frac{p_z z}{\hbar} \right)$$

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

$$\psi_p(\vec{x}) = A \exp \left( -i \frac{\vec{p}}{\hbar} \cdot \vec{x} \right)$$

$$\psi_n(\vec{x}) = A \cdot e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + B \cdot e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

### Pensando na ortogonalidade

$$\psi_k(\vec{x}) = A e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

$$\langle \psi'_k | \psi_k \rangle = \delta(\vec{k}' - \vec{k})$$

$$\langle \psi'_k | \psi_k \rangle = \int d\vec{x} |A|^2 e^{i\vec{k}' \cdot \vec{x}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} = \delta(\vec{k}' - \vec{k})$$

$$\langle \psi'_k | \psi_k \rangle = \iiint dx dy dz |A|^2 e^{i(k'_x - k_x)x} e^{i(k'_y - k_y)y} e^{i(k'_z - k_z)z}$$

Pela definição da função delta

---


$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp \, e^{i(x'-x)p} = 2\pi \delta(x' - x)$$

$$\langle \psi'_k | \psi_k \rangle = |A|^2 (2\pi)^3 \delta(k'_x - k_x) \delta(k'_y - k_y) \delta(k'_z - k_z)$$

$$A = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}$$

Quando falamos em partículas livres em coordenadas esféricas estamos falando que os autoestados de momento ou energia são ondas planas.

Qualquer estado físico pode ser descrito como uma superposição de autoestados de momento/energia

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle$$

$$\mathbb{1} = \int d\vec{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|$$

$$|\psi\rangle = \int d\vec{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|\psi\rangle$$

$$\langle \mathbf{x}|\psi\rangle = \psi(\vec{x})$$

$$|\psi\rangle = \int d\vec{x} \psi(\vec{x}) |\mathbf{x}\rangle$$

Posso escrever qualquer estado como uma superposição de ondas planas!

---

## Aula 15 - Momento angular em Mecânica Quântica

### MQ em 3D

Partícula livre  $\rightarrow$  coord. cartesianas  $\rightarrow$  autoestados de momento e energia  $\rightarrow$  ondas planas  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$   
 $k^2 = 2mE/\hbar^2$

### Partícula livre em coordenadas esféricas

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2}$$

$p_r \rightarrow$  projeção do momento na direção radial

$L = \vec{r} \times \vec{p} \rightarrow$  momento angular

$p_r$  é hermitiano?

$$p_r = \frac{1}{r} \vec{r} \cdot \vec{p} = \frac{1}{r} (xp_x + yp_y + zp_z)$$

$$(\hat{a}\hat{b})^\dagger = \hat{b}^\dagger \hat{a}^\dagger$$

$$p_r^\dagger = (\vec{p}^\dagger \cdot \vec{r}^\dagger) \left( \frac{1}{r} \right)^\dagger = (\vec{p} \cdot \vec{r}) \frac{1}{r} = (p_x x + p_y y + p_z z) \frac{1}{r} \neq p_r$$

Mudando para

$$p_r = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{r} \vec{r} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{r} \frac{1}{r} \right) \Rightarrow p_r^\dagger = p_r$$

Como escrever H no espaço de posições

$p_r$  no espaço de posições

$$\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$$

1 termo

$$\frac{1}{r} \vec{r} \cdot \vec{p} = \frac{1}{r} \vec{r} \cdot (-i\hbar \vec{\nabla}) = -i\hbar \frac{1}{r} \vec{r} \cdot \vec{\nabla}$$

$$\frac{1}{r} \vec{r} \cdot \vec{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$$

2 termo

$$(\vec{p} \cdot \vec{r}) \frac{1}{r} = -i\hbar (\vec{\nabla} \cdot \vec{r}) \frac{1}{r} = i\hbar \vec{\nabla} \cdot \vec{e}_r$$

$$p_r = -\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \vec{\nabla} \cdot \vec{e}_r \right)$$

Vamos aplicar  $p_r$  em uma função qualquer  $f(\vec{r})$

$$p_r f(\vec{r}) = -\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{e}_r \right) f(\vec{r})$$

$$p_r f(\vec{r}) = -\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial r} f + \vec{\nabla} \cdot \hat{r} f \right) = -\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial r} f + \mathbf{e}_r \cdot \vec{\nabla} f + f \vec{\nabla} \cdot \mathbf{e}_r \right)$$

$$p_r f(\vec{r}) = -\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial}{\partial r} f + \frac{\partial}{\partial r} f + f \vec{\nabla} \cdot \mathbf{e}_r \right)$$

$$\mathbf{e}_r = \frac{\vec{r}}{r}$$

$$\vec{\nabla} \mathbf{e}_r = \vec{\nabla} \left( \frac{\vec{r}}{r} \right) = \vec{r} \cdot \nabla \frac{1}{r} + \frac{1}{r} \vec{\nabla} \cdot \vec{r}$$

$$p_r f(\vec{r}) = -\frac{i\hbar}{2} \left[ 2 \frac{\partial}{\partial r} f + f \left( \vec{r} \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{r} + \frac{1}{r} \vec{\nabla} \cdot \vec{r} \right) \right]$$

$$\vec{\nabla} \xi = \left( \frac{\partial}{\partial r} \xi \right) \mathbf{e}_r + \dots$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\xi} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \xi_r) + \dots$$

$$\vec{r} \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{r} + \frac{1}{r} \vec{\nabla} \cdot \vec{r} = \vec{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \right) \mathbf{e}_r + \frac{1}{r} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^3) = -\frac{1}{r^2} r + \frac{1}{r^3} 3r^2 = \frac{2}{r}$$

$$p_r f(\vec{r}) = -\frac{i\hbar}{2} \left( 2 \frac{\partial}{\partial r} f + \frac{2}{r} f \right)$$

$$p_r f = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) f$$

$$P_r = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)$$

Ou, de forma equivalente

$$p_r = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$$

Substituindo na Hamiltoniana

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 + \frac{L^2}{2mr^2}$$

Hamiltoniana para a partícula livre em coordenadas esféricas

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 + \frac{L^2}{2mr^2}$$

Agora falta discutir o termo de momento angular

---

## Momento angular em Mecânica Quântica

Teoria de momento angular  $\rightarrow$  mais abrangente do que somente o momento angular clássico

$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \Rightarrow$  ex: Spin

**Momento angular orbital**  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = L_x \cdot \vec{e}_x + L_y \cdot \vec{e}_y + L_z \cdot \vec{e}_z$$

$$L_x = yP_z - zP_y$$

$$L_y = zP_x - xP_z$$

$$L_z = xP_y - yP_x$$

Observáveis referentes a momento angular  $\rightarrow$  Quais são os observáveis ?  $\rightarrow$  Quais os autovalores e autoestados?

Relações de comutação entre os operadores

As componentes são hermitianas

$$L_x^\dagger = (yp_z - zp_y)^\dagger = (p_z^\dagger y^\dagger - p_y^\dagger z^\dagger) = (p_z y - p_y z) = (yp_z - zp_y) = L_x$$

$$[L_x, L_y] = L_x L_y - L_y L_x = (yp_z - zp_y)(zp_x - xp_z) - (zp_x - xp_z)(yp_z - zp_y)$$

$$[L_x, L_y] = xp_y(zp_z - p_z z) - yp_x(zp_z - p_z z) = i\hbar(xp_y - yp_x)$$

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

Fazendo o mesmo para todas as componentes

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

As componentes do vetor  $\vec{L}$  não comutam entre si  $\Rightarrow$  existe um limite inferior não nulo da precisão na qual eu consigo medir as componentes de  $\vec{L}$

Não consigo medir simultaneamente  $L_x, L_y, L_z$  com varância nula!

Não consigo determinar o vetor  $\vec{L} \Rightarrow$  não é bem definido no espaço!

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

$$[L_z, L^2] = [L_z, L_x^2] + [L_z, L_y^2] + [L_z, L_z^2]$$

$$[L_z, L^2] = [L_z, L_x^2] + [L_z, L_y^2]$$

$$[L_z, L^2] = L_x [L_z, L_x] + [L_z, L_x] L_x + L_y [L_z, L_y] + [L_z, L_y] L_y$$

---

$$[L_z, L^2] = i\hbar L_x L_y + i\hbar L_y L_x - i\hbar L_y L_x - i\hbar L_x L_y$$

$$[L_z, L^2] = 0$$

O mesmo pode ser mostrado para as outras componentes

Em resumo

$$[L_i, L^2] = 0 \quad i = x, y, z$$

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k$$



---

## Aula 16 - Autovalores de momento angular

Vamos definir dois novos operadores

$$L_+ = L_x + iL_y$$

$$L_- = L_x - iL_y$$

$$L_-^\dagger = L_+$$

Relações de comutação

$$[L_z, L_+] = [L_z, L_x + iL_y] = [L_z, L_x] + i[L_z, L_y]$$

$$[L_z, L_+] = \hbar(L_x + iL_y) = \hbar L_+$$

$$[L_z, L_-] = \hbar L_-$$

$$[L^2, L_+] = \hbar L_+$$

$$[L^2, L_-] = -\hbar L_-$$

$$[L^2, L_+] = [L^2, L_x + iL_y] = [L^2, L_x] + i[L^2, L_y]$$

$$[L^2, L_+] = [L^2, L_-] = 0$$

Outra identidade importante

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

$$L_+ L_- = (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) = L_x^2 + L_y^2 + i(L_y L_x - L_x L_y)$$

$$L_+ L_- = L_x^2 + L_y^2 + \hbar L_z$$

$$L^2 = L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z$$

$$L^2 = L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z$$

### Autovalores de $L_z$

Autoestados de  $L_z \Rightarrow |m\rangle$

$$L_z |m\rangle = \hbar m |m\rangle$$

$$L_z (L_+ |m\rangle) = ?$$

$$[L_z, L_+] |m\rangle = (L_z L_+ - L_+ L_z) |m\rangle$$

$$[L_z, L_+] |m\rangle = L_z L_+ |m\rangle - L_+ L_z |m\rangle = \hbar L_+ |m\rangle$$

---


$$L_z L_+ |m\rangle - \hbar m L_+ |m\rangle = \hbar L_+ |m\rangle$$

$$L_z (L_+ |m\rangle) = \hbar(m+1) L_+ |m\rangle$$

$$L_+ |m\rangle \rightarrow |m+1\rangle$$

Logo,  $L_+ |m\rangle$  também é autoestado de  $L_z$  com autovalor  $\hbar(m+1)$

Analogamente

$$[L_z, L_-] |m\rangle \rightarrow L_z (L_- |m\rangle) = \hbar(m-1) L_- |m\rangle$$

$L_- |m\rangle$  também é autoestado de  $L_z$  com autovalor  $\hbar(m-1)$

$$L_+ (L_+ |m\rangle) \rightarrow L_+ (|m+1\rangle) \rightarrow |m+2\rangle$$

$$L_- (L_- |m\rangle) \rightarrow L_- (|m-1\rangle) \rightarrow |m-2\rangle$$

Operadores  $L_+$  e  $L_-$  incrementam ou diminuem o autovalor de  $L_z$

Autovalores possíveis para  $L_z \rightarrow \hbar(\dots, m+3, m+2, m+1, m, m-1, m-2, m-3, \dots)$

Vamos olhar  $L^2$

Sabemos que  $[L^2, L_z] = 0$ , logo, existe um conjunto de autoestados simultâneos de  $L^2$  e  $L_z$

$$L^2 |m\rangle = \hbar^2 k^2 |m\rangle$$

$$[L^2, L_+] = 0 \Rightarrow [L^2, L_+] |m\rangle = 0 \rightarrow (L^2 L_+ - L_+ L^2) |m\rangle = 0$$

$$L^2 L_+ |m\rangle - L_+ L^2 |m\rangle = 0$$

$$L^2 L_+ |m\rangle = L_+ L^2 |m\rangle$$

$$L^2 L_+ |m\rangle = \hbar^2 k^2 L_+ |m\rangle$$

$L_+ |m\rangle$  é autoestado de  $L^2$  com autovalor  $\hbar^2 k^2$

Portanto,  $L_+$  muda a componente em  $z$  do momento angular mas não muda o módulo do momento angular

O mesmo raciocínio pode ser usado para  $L_-$

Todo os autoestados  $\hbar(m+2, m+1, m, m-1, m-2, \dots) \rightarrow$

---

## Aula 20 - Partícula livre em coord esféricas, potenciais centrais e interação entre duas partículas

Hamiltoniano de uma partícula livre em coordenadas Esféricas

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2}$$

$$\hat{p}_r = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \Rightarrow \frac{\hat{p}_r^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2$$

$$\hat{H}\psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi)$$

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial}{\partial r} r \right)^2 + \frac{1}{2m} \frac{L^2}{r^2} \right) \psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi)$$

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi)$$

$$\left( p_r^2 + \frac{L^2}{r^2} \right) R(r) Y_l^m(\theta, \phi) = 2mE R(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi)$$

$$\left( -\hbar^2 \frac{\partial}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2} \right) R(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi) = 2mE R(r) \cdot Y_l^m$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rR(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} R(r) = -\frac{2mE}{\hbar^2} R(r)$$

$$\rho = kr, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} R(\rho) + \frac{2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} R(\rho) + \left[ 1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R(\rho) = 0$$

$$R(\rho) = \begin{cases} J_l(\rho) \\ N_l(\rho) \end{cases}$$

$$\Psi(r, \theta, \phi) = J_l(kr) \cdot Y_l^m(\theta, \phi)$$

$$J_l(\rho) = (-\rho)^\ell \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \frac{\sin \rho}{\rho}$$

---

## Harmônicos Esféricos

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\phi}$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

$$Y_{22} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2\theta e^{2i\phi}$$

$$Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta e^{i\phi}$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left( \frac{3}{2} \cos^2\theta - \frac{1}{2} \right)$$

$$Y_{33} = -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{35}{4\pi}} \sin^3\theta e^{3i\phi}$$

$$Y_{32} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \sin^2\theta \cos\theta e^{2i\phi}$$

$$Y_{31} = -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{21}{4\pi}} \sin\theta (5\cos^2\theta - 1) e^{i\phi}$$

$$Y_{30} = \sqrt{\frac{5}{2}} \cos^3\theta - \frac{3}{2} \cos\theta$$

---

## Aula 21 - Átomo de Hidrogênio

---

## Átomo de Hidrogênio

Equação de Laguerre

$$\rho \frac{d^2 F}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho) \frac{dF}{d\rho} + (\rho_0 - 2(l+1)) F = 0$$

Solução

$$L_n^m(x) = e^x \frac{x}{n!} \frac{d}{dx^n} (e^{-x} x^{n+m})$$

$$L_n^m(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j$$

$$\frac{d^2 F}{d\rho^2} \Rightarrow \sum_{j=2} c_j(j)(j-1)\rho^{j-2} \quad \frac{dF}{d\rho} \Rightarrow \sum_{j=1}^{\infty} c_j j \rho^{j-1}$$

$$c_{j+1} = c_j \left[ \frac{2(j+l+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2l+2)} \right]$$

$$|E| = \left( \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{\mu}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

---

## Aula 25 - Teoria de Perturbação

### Átomo de Hélio

Dois elétrons interagindo com o núcleo e interagindo entre si

$$H = \frac{p_1^2}{2\mu_1} - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} + \frac{p_2^2}{2\mu_2} - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$$H = H_1 + H_2 + H_{int}$$

Se não existisse  $H_{int}$

$$H = H_1 + H_2$$

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$E = E_1 + E_2$$

$$H|n_1, \ell_1, m_1\rangle = E_1 |n_1, \ell_1, m_1\rangle$$

### Teoria de Perturbação

Seja um problema conhecido cujo hamiltoniano já sabemos seus autoestados e autovalores

$$H_0 |\phi_n\rangle = E_n^0 |\phi_n\rangle$$

$$\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \delta_{mn}$$

E queremos resolver um problema com o hamiltoniano ligeiramente diferente

$$H = H_0 + \lambda W$$

Queremos encontrar os autoestados e autovalores de H

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

Podemos escrever os autoestados de H na base dos autoestados de  $H_0$

$$|\psi_n\rangle = \sum_k c_{nk} |\phi_k\rangle$$

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{k \neq n} c_{nk}(\lambda) |\phi_k\rangle$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} c_{nk}(\lambda) = 0$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} |\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle$$

$$c_{nk}(\lambda) = \lambda c_{nk}^{(1)} + \lambda^2 c_{nk}^{(2)} + \lambda^3 c_{nk}^{(3)} + \dots = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda^i c_{nk}^{(i)}$$

---


$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{k \neq n} \left( \sum_i \lambda^i c_{nk}^{(i)} \right) |\phi_k\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle + \lambda^2 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |\phi_k\rangle + \dots$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} E_n = E_n^0$$

$$E_n = E_n^0 + \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j E_n^{(j)} = E_n^0 + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \lambda^3 E_n^{(3)} + \dots$$

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

$$(H_0 + \lambda.W) |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

$$(H_0 + \lambda.W) \left( |\phi_n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle + \lambda^2 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |\phi_k\rangle + \dots \right) = \left( E_n^0 + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \right) \left( |\phi_n\rangle + \right. \\ \left. + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle + \lambda^2 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |\phi_k\rangle + \dots \right)$$

Termo  $\lambda^0$

$$H_0 |\phi_n\rangle = E_n^0 |\phi_n\rangle$$

Termo  $\lambda^1$

$$H_0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle + W |\phi_n\rangle = E_n^0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle + E_n^{(1)} |\phi_n\rangle$$

$$\sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} E_k^{(1)} |\phi_k\rangle + W |\phi_n\rangle = \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} E_n^0 |\phi_k\rangle + E_n^{(1)} |\phi_n\rangle$$

$$E_n^{(1)} |\phi_n\rangle = W |\phi_n\rangle + \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} (E_k^0 - E_n^0) |\phi_k\rangle$$

$$E_n^{(1)} = \langle \phi_n | W | \phi_n \rangle$$

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^{(1)} + \dots$$

$$E_n = E_n^0 + \langle \phi_n | \lambda W | \phi_n \rangle + \dots$$

$$E_n^{(1)} \langle \phi_m | \phi_n \rangle = \langle \phi_m | W | \phi_n \rangle + \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} (E_k^0 - E_n^0) \langle \phi_m | \phi_k \rangle$$

$$0 = \langle \phi_m | W | \phi_n \rangle + c_{nm}^{(1)} (E_m^0 - E_n^0)$$

$$c_{nm}^{(1)} = \frac{\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle}{E_n^0 - E_m^0}$$

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{\langle \phi_k | \lambda W | \phi_n \rangle}{E_n^0 - E_k^0} |\phi_k\rangle + \dots$$