Aula 21 (16/Mar)

No aula de hoje:

* Revisão da aula anterior.
* Propriedades da evolução temporal de um sistema quântico.
* Revisões para Prova 1.

—— // ——

Revisão da aula anterior

* Variáveis incompatíveis e relações de incerteza
* Propriedades da evolução temporal de um sistema quântico.

—— // ——

5.5) Propriedades evolução temporal de sistema quântico (cont.)

5.5.1) Evolução temporal do valor esperado de uma observável

Seja $\hat{A}$ observável e $|\psi(t)\rangle$ é estado normalizado. O valor esperado de $\hat{A}$

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

Tomando derivada temporal de $\langle \hat{A} \rangle(t)$ e usando eq. Schr.

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

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

$$+ \langle \psi(t) | \hat{A} \left(\frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} \right)$$

$$\frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}(t) | \psi(t) \rangle \quad , \quad \frac{\partial \langle \psi(t)|}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | \hat{H}(t)$$

$$= \langle \psi(t) | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi(t) \rangle + \frac{1}{i\hbar} \left[\langle \psi(t) | \hat{A} \hat{H} | \psi(t) \rangle - \langle \psi(t) | \hat{H} \hat{A} | \psi(t) \rangle \right]$$

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \left\langle \left[\hat{A}, \hat{H} \right] \right\rangle}$$

Muito semelhante à evolução temporal de uma quantidade física clássica, $f(q,p,t)$,

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\}$$

<u>Nota</u>: Se $\hat{A}$ não depender explicitamente do tempo e se comutar com o Hamiltoniano, então o seu valor esperado será constante do movimento, i.e. $\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = 0$.

<u>Teorema (Ehrenfest)</u>: As eqç de evolução temporal dos valores esperados de um sistema quântico são formalmente idênticas às eqç da Mec. Clássica.

Consideremos um sist. de uma partícula quântica em 1D sujeita a $V(x)$,

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x})$$

A evolução temporal de $\langle\hat{x}\rangle$ e $\langle\hat{P}\rangle$ será

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle = \cancel{\left\langle\frac{\partial\hat{x}}{\partial t}\right\rangle}^{\,0} + \frac{1}{i\hbar}\left\langle[\hat{x},\hat{H}]\right\rangle$$

$$[\hat{x},\hat{H}] = \left[\hat{x},\frac{\hat{P}^2}{2m}\right] + \cancel{[x,\hat{V}(\hat{x})]}^{\,0}$$

$$= \frac{1}{2m}[\hat{x},\hat{P}^2] = \frac{1}{2m}\left(\hat{x}\hat{P}^2 - \hat{P}^2\hat{x} + \hat{P}\hat{x}\hat{P} - \hat{P}\hat{x}\hat{P}\right)$$

$$= \frac{1}{2m}\left(\underbrace{[\hat{x},\hat{P}]}_{i\hbar\hat{1}}\hat{P} + \hat{P}\underbrace{[\hat{x},\hat{P}]}_{i\hbar\hat{1}}\right)$$

$$= \frac{i\cancel{2}\hbar}{\cancel{2}m}\hat{p}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} = \frac{1}{\cancel{i\hbar}}\frac{\cancel{i\hbar}}{m}\langle\hat{P}\rangle = \frac{\langle\hat{P}\rangle}{m}}$$

Para $\langle \hat{P} \rangle$, temos

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{P} \rangle = \left\langle \cancelto{0}{\frac{\partial \hat{P}}{\partial t}} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\left\langle [\hat{P},\hat{H}] \right\rangle$$

$$[\hat{P},\hat{H}] = \cancelto{0}{\left[\hat{P},\frac{\hat{P}^2}{2m}\right]} + [\hat{P},\hat{V}(\hat{X})]$$

$$V(\hat{x}) = V_0\hat{1} + V_1\hat{x} + V_2\hat{x}^2 + \dots$$

$$= \cancelto{0}{[\hat{P},V_0\hat{1}]} + V_1\underbrace{[\hat{P},\hat{X}]}_{-i\hbar\hat{1}} + V_2\underbrace{[\hat{P},\hat{X}^2]}_{[\hat{P},\hat{X}]\hat{X}+\hat{X}[\hat{P},\hat{X}]} + \dots$$

$$= 0 - i\hbar V_1\hat{1} - i2\hbar V_2\hat{X} + \dots$$

$$= -i\hbar\frac{d\hat{V}(\hat{X})}{d\hat{X}}$$

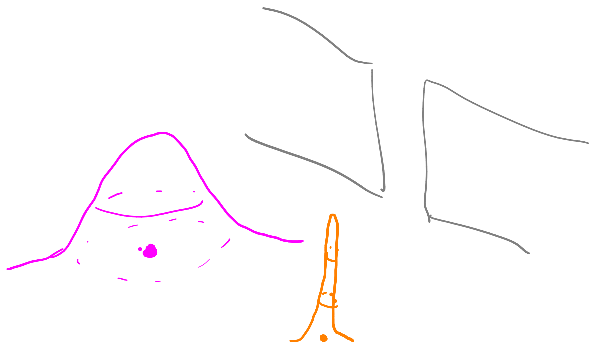
$$\Rightarrow \frac{d\langle \hat{P} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}(-i\hbar)\left\langle \frac{d\hat{V}(\hat{X})}{dt} \right\rangle$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\frac{d\langle \hat{P} \rangle}{dt} = -\left\langle \frac{dV(\hat{X})}{dt} \right\rangle}$$

que reproduzem eqs clássicas

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m} \quad e \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{dV}{dx}$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \implies \left|\; \begin{aligned} \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial x} \implies \dot{p} = -\frac{dV}{dx} \\ \dot{x} &= \frac{\partial H}{\partial p} \implies \dot{x} = \frac{p}{m} \end{aligned} \right.$$



<u>Nota:</u> Se o estado quântico é bem descrito pelo valor esperado (ex., p.o. muito concentrado em torno do val. esperado), então podemos usar o tratamento clássico em vez do quântico.

5.5.2) <u>Sistemas conservativos</u>

Se $\hat{H}(t) = \hat{H}$ for independente do tempo, o sistema diz-se <u>conservativo</u>.

$\downarrow$

Em MC a energia total será constante movimento $\frac{dH}{dt} = \cancel{\frac{\partial H}{\partial t}}^{\,0} + \{H,H\} = 0$

Mas e o que é que acontece em MQ?

outras observáveis ECOC

Como temos $\hat{H}|\varphi_{n,\tau}\rangle = E_n|\varphi_{n,\tau}\rangle$, e já que $\hat{H}$ é indep. do tempo então $|\varphi_{n\tau}\rangle$ e E_n são indep. do tempo.

Um $|\psi(t)\rangle = \sum_{n,\tau} c_{n,\tau}(t)|\varphi_{n,\tau}\rangle$ evoluirá de acordo com

$$\langle\varphi_{n,\tau}|\left[i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle\right]$$

$$\Leftrightarrow i\hbar\frac{d}{dt}\underbrace{\langle\varphi_{n\tau}|\psi(t)\rangle}_{= c_{n\tau}(t)} = E_n\underbrace{\langle\varphi_{n\tau}|\psi(t)\rangle}_{= c_{n\tau}(t)}$$

$$\Leftrightarrow i\hbar\frac{d}{dt}c_{n\tau}(t) = E_n c_{n\tau}(t)$$

$$\Leftrightarrow c_{n\tau}(t) = c_{n\tau}(t_0)\cdot e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}$$

Assim, a evolução de $|\psi(t)\rangle$

(i) Expandir $|\psi(t_0)\rangle$ na base auto-estados $\hat{H}$

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_n\sum_\tau c_{n\tau}(t_0)|\varphi_{n\tau}\rangle$$

(ii) Multiplicar cada coeficiente $c_{n\tau}(t_0)$ pela respectiva evolução temporal

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \sum_\tau c_{n\tau}(t_0)\, e^{-iE_n.(t-t_0)/\hbar} |\varphi_{n\tau}\rangle$$

Se $|\psi(t_0)\rangle$ for auto-estado de $\hat{H}$ então vamos chamar de <u>estado estacionário</u>, pois a sua evol. temporal acrescenta só uma fase

$$|\psi(t)\rangle \overset{|\psi(t_0)\rangle = |\varphi_{n,\tau}\rangle}{=} e^{-iE_n.(t-t_0)/\hbar} |\varphi_{n,\tau}\rangle$$

$$\Rightarrow \langle\psi(t)|\hat{O}|\psi(t)\rangle = \langle\varphi_{n\tau}|\hat{O}|\varphi_{n\tau}\rangle$$

<u>Nota</u>: Se num estado arbitrário $|\psi\rangle$ medimos a energia num dado instante, então $\hat{H}(t) = \hat{H}$, daí em diante energia terá sempre esse valor.

Constantes do movimento são observáveis que obedecem a

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0 \quad , \quad [\hat{A}, \hat{H}] = 0$$

tal que quando $\hat{H}$ indep. tempo, $\hat{A}$ é constt movimento:

(i) Valor esperado é constante movimento

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = 0$$

(ii) Os a_n são bons números quânticos.
Como $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$, podem fazer parte mesmo CCOC, tendo base comum

$$\hat{H} | \varphi_{n,p,r} \rangle = E_n | \varphi_{n,p,r} \rangle \,,$$
$$\hat{A} | \varphi_{n,p,r} \rangle = a_p | \varphi_{n,p,r} \rangle \,,$$

e como $|\varphi_{npr}\rangle$ estados estacionários, se medir a_p num instante t_0, mediremos a_p em qq instante posterior.

Nota: Se $\hat{A}(t)$ também pode comutar com $\hat{H}$, ter base auto-estados comuns, mas auto-val. evoluem no tempo.

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} \Rightarrow \hat{H} | p \rangle = \frac{p^2}{2m} | p \rangle$$

$$\hat{A}(t) = \hat{P}.t \Rightarrow \hat{A}(t) | p \rangle = p.t \, | p \rangle$$

(iii) Probabilidade de encontrar $\underline{a_p}$ é independente do tempo, pois se

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_{mp\pi} c_{mp\pi}(t_0)|\varphi_{mp\pi}\rangle \longrightarrow \mathcal{P}_{ap}(t_0) = \sum_{m\pi} |c_{mp\pi}(t_0)|^2$$

quando evol. temporal

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{m} e^{-iE_m.(t-t_0)/\hbar} \sum_{p\pi} c_{mp\pi}(t_0)\,|\varphi_{mp\pi}\rangle$$

$$\hookrightarrow \mathcal{P}_{ap}(t) = \sum_{m\pi} |e^{-i\cdots} . c_{mp\pi}(t_0)|^2$$

$$= \sum_{m\pi} |c_{mp\pi}(t_0)|^2$$

Note: Se sist. conservativo, teremos um princípio incerteza adicional, agora envolvendo ΔE e Δt, $\boxed{\Delta E \Delta t \gtrsim \hbar}$.

Seja $\hat{H}|\varphi_i\rangle = E_i|\varphi_i\rangle$, com

$$|\psi(t_0)\rangle = c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle$$

$$\Big\downarrow \text{ evol. temporal}$$

$$|\psi(t)\rangle = c_1 . e^{-iE_1\frac{t-t_0}{\hbar}}|\varphi_1\rangle + c_2\, e^{-iE_2\frac{t-t_0}{\hbar}}|\varphi_2\rangle$$

Teremos então podemos dizer que $\Delta E \simeq |E_1 - E_2|$.

Considerando $\hat{B}$ que $[\hat{B}, \hat{H}] \neq 0$, então se $\hat{B}|u_m\rangle = b_m|u_m\rangle$ teremos

$$P_{b_m}(t) = |\langle u_m|\psi(t)\rangle|^2 = \left|c_1 e^{-iE_1\cdots}\langle u_m|\varphi_1\rangle + c_2 e^{-iE_2\cdots}\langle u_m|\varphi_2\rangle\right|^2$$

$$= |c_1|^2|\langle u_m|\varphi_1\rangle|^2 + |c_2|^2 \cdot |\langle u_m|\varphi_2\rangle|^2 + \underline{c_1^* c_2 \cdot e^{i(E_1-E_2)\cdots}}$$

$$\underline{\langle u_m|\varphi_1\rangle^* \langle u_m|\varphi_2\rangle + c_1 c_2^* e^{-i(E_1-E_2)\cdots} \langle u_m|\varphi_1\rangle\langle u_m|\varphi_2\rangle^*}$$

$$\parallel$$

$$2\mathrm{Re}[|z| \cdot e^{i\theta}] = 2\cos(\theta)$$

onde $\theta = (E_1 - E_2)\frac{t-t_0}{\hbar} + \cdots$. Assim, o tempo característico de evolução do sistema será $\Delta\theta \simeq 2\pi$,

$$\Delta t \simeq \frac{\hbar}{E_1 - E_2} \qquad = \Delta E$$

$$\Rightarrow \Delta E \Delta t \simeq \hbar$$

Revisão P1

① Cap. 1: Tópicos M.C

* Formalismo newtoniano, $\vec{F} = m\vec{a}$.
* " Lagrangeano, $\mathcal{L}(q,\dot{q},t) = T(\dot{q}) - V(q)$

↳ eqçs E-L, $\dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}\right) = 0$

↳ T. Nöther

* Formalismo Hamiltoniano, $H(q,p,t) =$
$= p\dot{q}(q,p,t) - \mathcal{L}(q,\dot{q}(q,p,t),t)$

↳ eqç Hamilton, $\dot{p} = -\dfrac{\partial H}{\partial q}$, $\dot{q} = \dfrac{\partial H}{\partial p}$

↳ evolução temporal $f(q,p,t)$

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\}$$

② Cap. 2: Propriedades quânticas funda.

* Fenomenologia

↳ quantificação (algumas) grandezas físicas.

↳ dualidade onda-partícula

↳ medição sist. quântico

* Interpretação Copenhagen

↳ $\Psi(t)$ amplitude prob.

↳ Eq. Schr. evolui no tempo.

↳ interpretação canônica

↳ Princípio Incerteza Heisenberg.

↳ Aplicabilidade MQ.

③ Cap. 3 – Eq. Schr

* Pacote ondas

* Potenciais indep. tempo

↳ separação variáveis

↳ eq. Schr indep tempo $H\psi = E\psi$

↳ Potenciais 1D quadrados

- soluções gerais
- continuidade f.o.

(4) Cap. 4 — Formalismo matemático MQ

* Espaço $\mathcal{F}$.
    ↳ estrutura $\mathcal{F}$
    ↳ produto escalar
    ↳ Bases $\mathcal{F}$
    ↳ operadores

* Notação Dirac.
    ↳ espaço estados $\mathcal{E}$ e $\mathcal{E}^*$
    ↳ kets, bras,
    ↳ operadores ; $\hat{A}^+ = \hat{A}$
    ↳ Representações

        kets → [ ] , bras → [ ]

        operadores → [ ]

    ↳ Observáveis
        ↳ ECOCs , $[\hat{A},\hat{B}] =$

    ↳ Produto tensorial

(5) Cap. 5 - Postulados MQ

* Postulados MC.
* Postulados MQ
  - ↳ Como descrever sistema?
    - ▲P1 : $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$.
  - ↳ Como medição?
    - ▲P2 : $A \rightarrow \hat{A}$ é observável
    - ▲P3 : resultados possíveis são auto-valores de $\hat{A}$.
    - ▲P4 : probabilidade dos coeficientes
    - ▲P5 : colapso f.o. com medição
  - ↳ Como evolui?
    - ▲P6 : Eq. Sch.

* Quantificação canônica
  - ↳ $\{\vec{r}, \vec{p}\} \longrightarrow |\psi\rangle \in \mathcal{E}$
  - ↳ $A(\vec{r}, \vec{p}, t) \longrightarrow \hat{A}(\hat{\vec{R}}, \hat{\vec{P}}, t)$
  - ↳ relações comutação

* Variáveis compatíveis/incompatíveis
  - ↳ compat. $\iff [A, B] = 0$.

↳ Val. esperado $\langle \hat{A} \rangle$, desvio padrão ΔA.

↳ Incompatibilidade => P. incerteza

* Evolução temporal

↳ Propriedades

- Determinista
- Sobreposição
- conservação prob

↳ Evolução $\langle A \rangle$ => teorema Ehrenfest.

↳ Sistemas conservativos