Mecânica Quântica

matheus.coutinho9

September 2021

Aula 3 - Estados em Mecânica Quântica e Notação de Dirac

Produto escalar entre dois vetores

Base $|k\rangle$

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

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_k \psi_k^* \langle k| \sum_m \phi_m |m\rangle = \sum_k \sum_m \psi_k^* \phi_m \langle k|m\rangle$$

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_k \psi_k^* \cdot \phi_k$$

$$\boxed{\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*}$$

Se eu tomar o produto entre um elemento da base e um vetor

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

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

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

Podemos escrever o produto escalar

$$\langle\psi|\phi\rangle = \int d\xi \; \psi^*(\xi) \langle\xi| \int d\xi \; \phi(\zeta) |\zeta\rangle = \int\int d\xi d\zeta \; \psi^*(\xi)\phi(\zeta)\langle\xi|\zeta\rangle$$

$$\langle\psi|\phi\rangle = \int d\xi \; \psi^*(\xi)\phi(\xi)$$

Uma base muito comum é a base de posição

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

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 resuktado $|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ 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 $\hat{Y}^\dagger$

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

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

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

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

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

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

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

$$\langle\psi| = \sum_i \psi_i^*\langle i| \Rightarrow (\psi_1^* \ldots \psi_n^*)$$

Um operador $\hat{X}$ qualquer

$$\hat{X}|\psi\rangle = |\phi\rangle$$
$$\langle\psi|X^\dagger \Rightarrow \langle\phi|$$

Operadores são matrizes quadradas de mesma dimensão da base

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

Seja $\hat{A}$ um operador

$$\hat{A} = \mathbb{1}\hat{A}\mathbb{1} = \sum_i |i\rangle\langle i|\hat{A}\sum_j |j\rangle\langle j|$$

$$\hat{A} = \sum_i\sum_j |i\rangle\langle i|\hat{A}|j\rangle\langle j|$$

$$A_{ij} = \langle i|\hat{A}|j\rangle$$

$$\hat{A} = \sum_i\sum_j A_{ij}|i\rangle\langle j|$$

$$\hat{A}^\dagger = \sum_i \sum_j A^*_{ij} |j\rangle\langle i|$$

$\hat{A}^\dagger \rightarrow$ 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 medí-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.

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

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

$H(x)$ 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 $|x\rangle \Rightarrow x\delta(x'-x)$

$$\langle x \rangle = \int\int dx' dx \; \psi^*(x) \; x.\delta\left(x'-x\right)\psi(x)$$

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

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

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

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

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

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

distribuição de probabilidade $\rightarrow$ variância nula

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

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

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

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

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

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

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

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

A equação acima é uma equação de autovalores para o operador $\hat{A}$ onde a 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 a

Teorema: autoestados de operadores hermitianos são ortonormais entre si

$$\left\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \right\rangle = \langle \psi_1 | \left(\hat{A} \, |\psi_2\rangle \right) = \langle \psi_{\perp} \, | a_2 | \, \psi_2 \rangle = a_2 \, \langle \psi_1 \mid \psi_2 \rangle$$

$$\left\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \right\rangle = \left(\langle \psi_1 | \, A^{\dagger} \right) |\psi_2\rangle = \langle \psi_2 \, | a_1 | \, \psi_2 \rangle = a_1 \, \langle \psi_2 \mid \psi_2 \rangle$$

$$a_2 \, \langle \psi_1 \mid \psi_2 \rangle = a_1 \, \langle \psi_1 \mid \psi_2 \rangle \Rightarrow (a_2 - a_1) \, \langle \psi_1 \mid \psi_2 \rangle = 0$$

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

Autoestados de posição

$$\hat{x}\left|x^{\prime}\right\rangle=x^{\prime}\left|x^{\prime}\right\rangle$$

$$\left\langle x^{\prime} \mid x^{\prime}\right\rangle=1$$

$$\left\langle x^{\prime} \mid x^{\prime \prime}\right\rangle=\delta\left(x^{\prime}-x^{\prime \prime}\right)$$

$$\langle\hat{x}\rangle=\left\langle x^{\prime}|\hat{x}| x^{\prime}\right\rangle=x^{\prime}\left\langle x^{\prime} \mid x^{\prime}\right\rangle=x^{\prime}$$

$$|\psi\rangle=\sum_{i} \psi_{i}\left|a_{i}\right\rangle \longrightarrow|\psi\rangle=\int d x^{\prime} \psi\left(x^{\prime}\right)\left|x^{\prime}\right\rangle$$

$$\langle x \mid \psi\rangle=\int d x^{\prime} \psi\left(x^{\prime}\right)\left\langle x \mid x^{\prime}\right\rangle=\int d x^{\prime} \psi\left(x^{\prime}\right) \delta\left(x-x^{\prime}\right)=\psi(x)$$

Autoestados de momento na representação da base de posição

$$\hat{p}|p\rangle=p^{\prime}\left|p^{\prime}\right\rangle$$

$$\left\langle p^{\prime} \mid p^{\prime}\right\rangle=1$$

$$\left\langle p^{\prime \prime} \mid p^{\prime}\right\rangle=\delta\left(p^{\prime \prime}-p^{\prime}\right)$$

$$|p\rangle=\int d x^{\prime} \psi_{p}\left(x^{\prime}\right)\left|x^{\prime}\right\rangle$$

$$\mathbb{1} \hat{p} \mathbb{1}|p\rangle=\mathbb{1} p^{\prime} \mathbb{1}\left|p^{\prime}\right\rangle$$

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

$$\int d x^{\prime \prime}\left|x^{\prime \prime}\right\rangle\left\langle x^{\prime \prime}\right|\ \hat{p}\ \int d x^{\prime}\left|x^{\prime}\right\rangle\left\langle x^{\prime} | p\right\rangle=p \int d x^{\prime \prime}\left|x^{\prime \prime}\right\rangle\left\langle x^{\prime \prime}\right| \int d x^{\prime}\left|x^{\prime}\right\rangle\langle x \mid p\rangle$$

$$\int \int d x^{\prime \prime} d x^{\prime}\left|x^{\prime \prime}\right\rangle\left\langle x^{\prime \prime}|\hat{p}| x^{\prime}\right\rangle \psi_{p}\left(x^{\prime}\right)=p \int \int d x^{\prime \prime} d x^{\prime}\left|x^{\prime \prime}\right\rangle\left\langle x^{\prime \prime} \mid x^{\prime}\right\rangle \psi_{p}\left(x^{\prime}\right)$$

$$\int \int d x^{\prime \prime} d x^{\prime}\left|x^{\prime \prime}\right\rangle\left\langle x^{\prime \prime}|\hat{p}| x^{\prime}\right\rangle \psi_{p}\left(x^{\prime}\right)=p \int d x^{\prime} \psi_{p}\left(x^{\prime}\right)\left|x^{\prime}\right\rangle$$

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 $|\psi(t)\rangle$

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

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

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

Em $t > t_0$

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

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

Conservação de probabilidades

$$\langle\psi(t) \mid \psi(t)\rangle = \left\langle\psi\left(t_0\right) \mid \psi\left(t_0\right)\right\rangle = 1$$

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

Como

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

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

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

Transformações Sucessívas

$$\left|\psi\left(t_0\right)\right\rangle \rightarrow \left|\psi\left(t_1\right)\right\rangle \rightarrow \left|\psi\left(t_2\right)\right\rangle \rightarrow \cdots \left|\psi\left(t_n\right)\right\rangle$$

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

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

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

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

Transformações infinitesimais

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

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

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

$\mathcal{U}$ pode ser escrito como

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

Ω é um operador hermitiano

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

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

Ω deve ter unidade de frequência $\omega = \dfrac{E}{\hbar}$

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

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

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

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

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

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

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.

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

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

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

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

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

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

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

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

Aula 9 - Representação de Heisenberg

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

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 esperadores para o observável A são equivalentes nas duas representações

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

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

Valor esperado de A

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

$\left\langle \hat{A}^{(H)} \right\rangle = \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle = \left\langle \hat{A}^{(S)} \right\rangle \quad \Rightarrow$ 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

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

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

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

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

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

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

$$A^\dagger = H$$

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

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

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

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

$\hat{A} \Rightarrow$ 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

O momento de dipolo magnético do átomo possui apenas suas projeções possíveis no eixo do campo magnético $\mu_z = \pm\mu$

Aula 13 - Oscilador Harmônico

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$|n\rangle$ 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 $(E_n - \hbar\omega)$

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

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

a é chamado de operador de abaixamento.

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

$a^\dagger$ 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

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

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

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

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

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

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

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

$$\Delta E_{n+n\pm1} = \pm\hbar\omega$$

Autoestados

Valores esperados de H no autoestado n

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

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

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

$aa^\dagger = N \rightarrow$ Operador número

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

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

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

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

Da mesma forma

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

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

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

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

$$\langle 0 \mid 0\rangle = 1$$

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

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

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

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

Conjunto de autoestados $\quad\Rightarrow\quad |n\rangle = \dfrac{\left(a^{\dagger}\right)^{n}}{\sqrt{n!}}|0\rangle$

Aula 20 - Potencial Central

Hamiltoniano de uma partícula livre em coordenadas Esféricas

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$R(\rho) = \begin{cases} J_\ell(\rho) \\ N_\ell(\rho) \end{cases}$$

$$\Psi(r,\theta,\phi) = J_\ell(kr)\cdot Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

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

Harmônicos Esféricos

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Átomo de Hidrogênio

Equação de Laguerre

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

Solução

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

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

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

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

$$|E| = \left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\frac{\mu}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

Aula 25 - Teoria de Pertubação

Átomo de Hélio

Dois elétrons interagindo com o núcleo e interagindo entre si

$$H = \frac{P_1^2}{2\mu_1} - \frac{ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r_1} + \frac{P_2^2}{2\mu_2} - \frac{ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r_2} + + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

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

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 Pertubação

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$+ \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\phi_k\rangle + \lambda^2 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |\phi_k\rangle + \cdots \Bigg)$$

Termo λ^0

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

Termo λ^1

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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