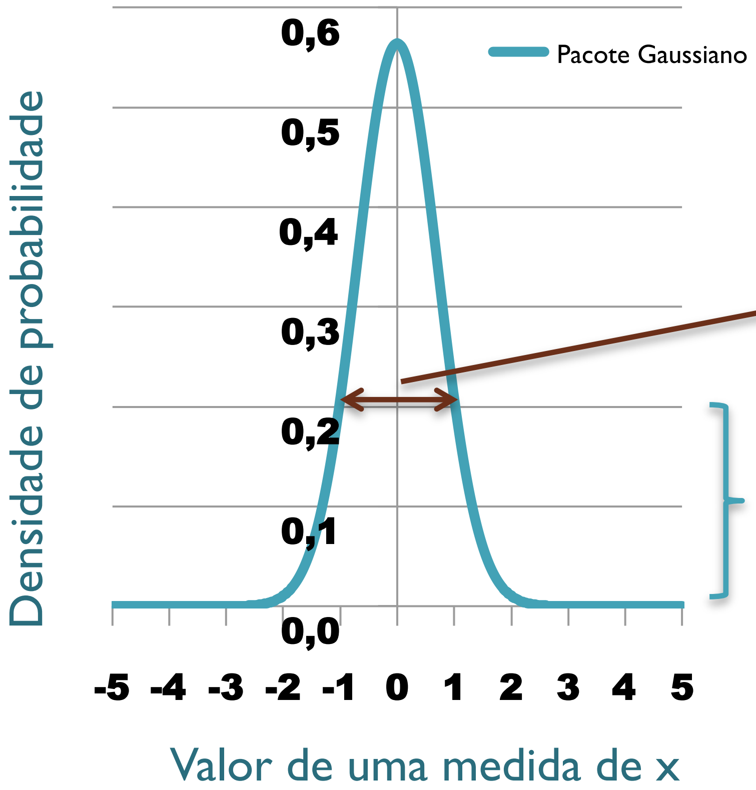
Pacote de ondas Gaussiano

Estudaremos o pacote $\langle x'|\alpha\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}d^{1/2}} \exp\left[ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}\right]$

A densidade de probabilidade de encontrar a partícula deste pacote é:

$$|\langle x'|\alpha\rangle|^2 = \frac{1}{\pi^{1/2}d} \exp\left[-\frac{x'^2}{d^2}\right]$$



$2d$ (tomei $d = 1,0$)

$$|\langle x' = d|\alpha\rangle|^2 = \frac{1}{e\pi^{1/2}d} \approx 0,21$$

$$|\langle x' = d|\alpha\rangle|^2 = \frac{1}{e}|\langle x'|\alpha\rangle|^2_{max}$$

Pacote de ondas Gaussiano

Calculemos: $\langle x\rangle_\alpha, \langle x^2\rangle_\alpha,$ e $\langle(\Delta x)^2\rangle_\alpha$ para $\langle x'|\alpha\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}d^{1/2}}\exp\left[ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}\right]$

$$\langle x\rangle_\alpha = \langle\alpha|x|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\langle\alpha|x'\rangle\langle x'|x|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' x'|\langle x'|\alpha\rangle|^2$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}d}\int_{-\infty}^{+\infty} dx' x' exp(-\frac{x'^2}{d^2}) = 0 \longrightarrow \text{ integrando ímpar}$$

função ímpar X função par = função ímpar

$$\langle x^2\rangle_\alpha = \langle\alpha|x^2|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\langle\alpha|x'\rangle\langle x'|x^2|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' x'^2|\langle x'|\alpha\rangle|^2$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}d}\int_{-\infty}^{+\infty} dx' x'^2 exp(-\frac{x'^2}{d^2}) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}d}\{-\frac{d}{d\xi}\int_{-\infty}^{+\infty} dx' exp(-\xi x'^2)\} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}d} \times -\frac{d}{d\xi}\sqrt{\frac{\pi}{\xi}} = \frac{1}{\xi^{3/2}d} = \frac{d^2}{2}$$

$$\xi = \frac{1}{d^2}$$

$$\boxed{\text{Assim, } \langle(\Delta x)^2\rangle_\alpha = \langle x^2\rangle_\alpha - \langle x\rangle_\alpha^2 = \frac{d^2}{2}}$$

Instituto de Física Gleb Wataghin

MAPLima

UNICAMP

Pacote de ondas Gaussiano

Calculemos: $\langle p\rangle_\alpha, \langle p^2\rangle_\alpha$, e $\langle(\Delta p)^2\rangle_\alpha$ para $\langle x'|\alpha\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}d^{1/2}}\exp\left[ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}\right]$

$$\langle p\rangle_\alpha = \langle\alpha|p|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\langle\alpha|x'\rangle\langle x'|p|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\langle\alpha|x'\rangle \times \{-i\hbar\frac{d}{dx'}\langle x'|\alpha\rangle\}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\langle\alpha|x'\rangle(-i\hbar)(ik - \frac{x'}{d^2})\langle x'|\alpha\rangle =$$

$$= \hbar k\int_{-\infty}^{+\infty} dx'|\langle x'|\alpha\rangle|^2 + \frac{i\hbar}{d^2}\int_{-\infty}^{+\infty} dx' x'|\langle x'|\alpha\rangle|^2 = \hbar k$$

$$\langle p^2\rangle_\alpha = \langle\alpha|p^2|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\langle\alpha|x'\rangle\langle x'|p^2|\alpha\rangle =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\langle\alpha|x'\rangle \times \{(-i\hbar)^2\frac{d^2}{dx'^2}\langle x'|\alpha\rangle\} = \frac{\hbar^2}{2d^2} + \hbar^2 k^2$$

exercício para casa

$$\boxed{\text{Assim, } \langle(\Delta p)^2\rangle_\alpha = \langle p^2\rangle_\alpha - \langle p\rangle_\alpha^2 = \frac{\hbar^2}{2d^2}}$$

A relação de incerteza fica $\langle(\Delta x)^2\rangle_\alpha\langle(\Delta p)^2\rangle_\alpha = \frac{d^2}{2}\times\frac{\hbar^2}{2d^2} = \frac{\hbar^2}{4} \geq \frac{\hbar^2}{4}$

O pacote de ondas gaussiano fornece o limite inferior

Pacote de ondas Gaussiano

Calculemos: $\langle p'|\alpha\rangle$ para $\langle x'|\alpha\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4} d^{1/2}} \exp\left[ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}\right]$

$$\begin{aligned}
\langle p'|\alpha\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle p'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(-\frac{ip'x'}{\hbar})\}\{\frac{1}{\pi^{1/4}d^{1/2}} \exp(ikx' - \frac{x'^2}{2d^2})\} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\pi^{1/4}d^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \exp(-\frac{ip'x'}{\hbar} + ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\pi^{1/4}d^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \exp\{-[\frac{x'}{2^{1/2}d} - \frac{id}{2^{1/2}}(\frac{p'}{\hbar} - k)]^2 - \frac{d^2}{2\hbar^2}(p' - \hbar k)^2\} \\
&= \frac{2^{1/2}d}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\pi^{1/4}d^{1/2}} \exp[-\frac{d^2}{2\hbar^2}(p' - \hbar k)^2] \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi' \exp[-\xi'^2]}_{\pi^{1/2}} \\
&= \frac{d^{1/2}}{\hbar^{1/2}\pi^{1/4}} \exp[-\frac{d^2}{2\hbar^2}(p' - \hbar k)^2]
\end{aligned}$$

$$\xi' = \frac{x'}{2^{1/2}d} - \frac{id}{2^{1/2}}(\frac{p'}{\hbar} - k)$$

Pacote de ondas Gaussiano

$$\text{Resumindo: } \langle x'|\alpha\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}d^{1/2}}\exp\left[ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}\right]$$

$$\langle p'|\alpha\rangle = \frac{d^{1/2}}{\hbar^{1/2}\pi^{1/4}}\exp\left[-\frac{d^2}{2\hbar^2}(p'-\hbar k)^2\right]$$

Comentários:

1)$\langle x'|\alpha\rangle$ é uma onda plana modulada por uma gaussiana centrada em zero

2)$\langle p'|\alpha\rangle$ é uma gaussiana centrada em $\hbar k$

3)$|\langle x'|\alpha\rangle|^2$ é uma gaussiana centrada em zero com largura d

4)$|\langle p'|\alpha\rangle|^2$ é uma gaussiana centrada em $\hbar k$ com largura $\dfrac{1}{d}$

5)Quando $|\langle x'|\alpha\rangle|^2$ afina, $|\langle p'|\alpha\rangle|^2$ alarga, e vice-versa

6) $\lim_{d\to 0}\langle x'|\alpha\rangle \propto \delta(x')$. Analise casos: $x'=0$ e $x'\neq 0$.

7) $\lim_{d\to\infty}\langle x'|\alpha\rangle \propto$ onda plana com amplitude pequena e independente de x'.

8) $\lim_{d\to 0}\langle p'|\alpha\rangle \propto$ amplitude pequena e independente de p'

9) $\lim_{d\to\infty}\langle p'|\alpha\rangle \propto \delta(p'-\hbar k)$. Analise casos: $p'=\hbar k$ e $p'\neq \hbar k$.

Representação das coordenadas e dos momentos em 3-D

1) $\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{x}'|\mathbf{x}'\rangle$ onde $\mathbf{x} = (x, y, z)$; $\mathbf{x}' = (x', y', z')$; e $|\mathbf{x}'\rangle = |x', y', z'\rangle$

2) $\mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle = \mathbf{p}'|\mathbf{p}'\rangle$ onde $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$; $\mathbf{p}' = (p'_x, p'_y, p'_z)$; e $|\mathbf{p}'\rangle = |p'_x, p'_y, p'_z\rangle$

3) $\langle \mathbf{x}'|\mathbf{x}''\rangle = \delta^3(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') = \delta(x' - x'')\delta(y' - y'')\delta(z' - z'')$

4) $\langle \mathbf{p}'|\mathbf{p}''\rangle = \delta^3(\mathbf{p}' - \mathbf{p}'') = \delta(p'_x - p''_x)\delta(p'_y - p''_y)\delta(p'_z - p''_z)$

5) $\int d^3x'|\mathbf{x}'\rangle\langle \mathbf{x}'| = \mathbb{1}; \quad \int d^3p'|\mathbf{p}'\rangle\langle \mathbf{p}'| = \mathbb{1}$

6) $$\langle \beta|\mathbf{p}|\alpha\rangle = \int d^3x'\langle \beta|\mathbf{x}'\rangle\langle \mathbf{x}'|\mathbf{p}'|\alpha\rangle = \int d^3x'\langle \beta|\mathbf{x}'\rangle[-i\hbar\nabla\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle]$$
$$= \int d^3x'\phi^*_\beta(\mathbf{x}')[-i\hbar\nabla\psi_\alpha(\mathbf{x}')]$$

7) $$\langle \mathbf{x}'|\mathbf{p}'\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i\mathbf{p}'.\mathbf{x}'}{\hbar}\right)$$

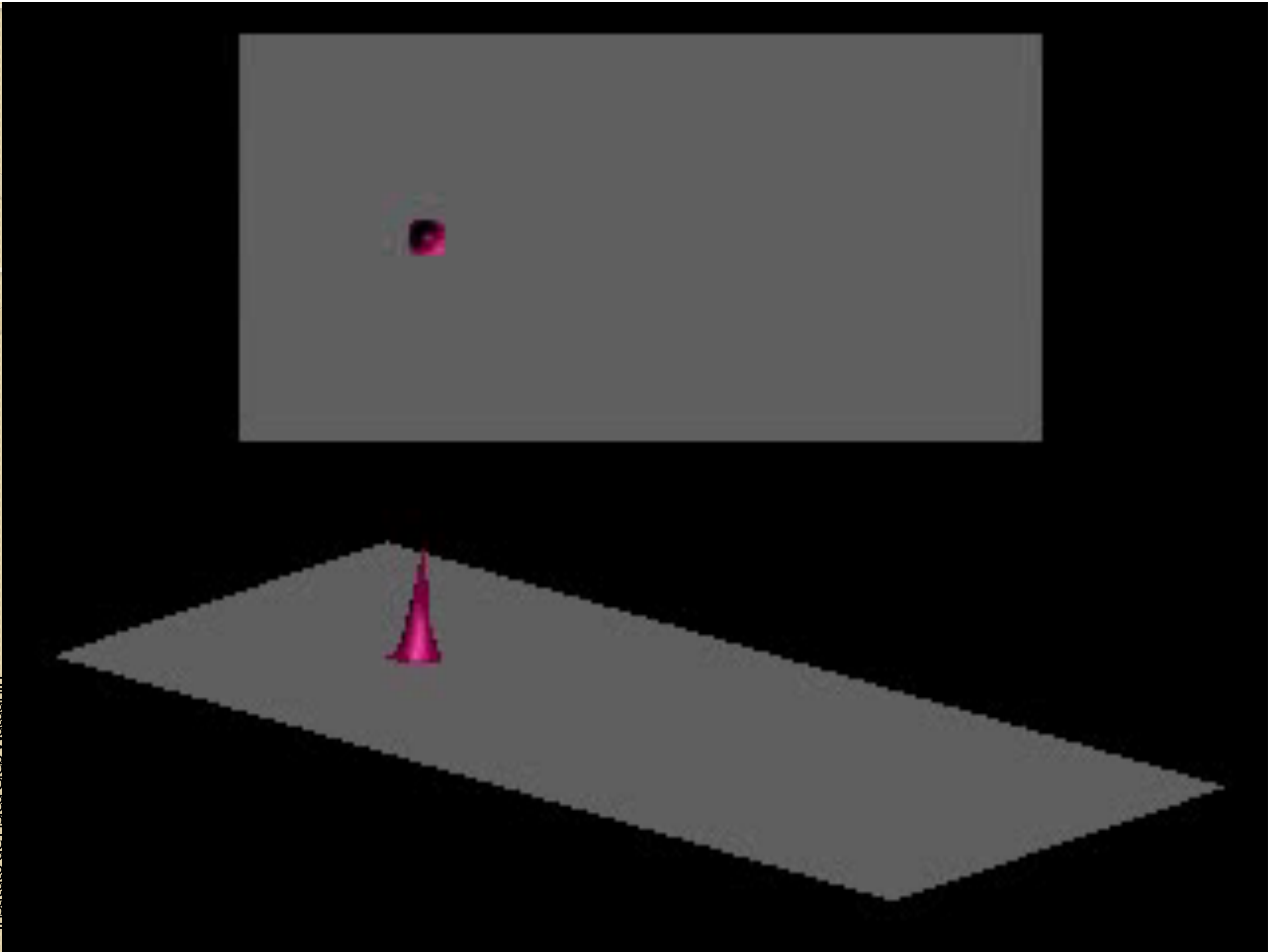
8) $$\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle = \psi_\alpha(\mathbf{x}') = \int d^3p'\langle \mathbf{x}'|\mathbf{p}'\rangle\langle \mathbf{p}'|\alpha\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3p' \exp\left(\frac{i\mathbf{p}'.\mathbf{x}'}{\hbar}\right)\phi_\alpha(\mathbf{p}')$$

9) $$\langle \mathbf{p}'|\alpha\rangle = \phi_\alpha(\mathbf{p}') = \int d^3x'\langle \mathbf{p}'|\mathbf{x}'\rangle\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3x' \exp\left(-\frac{i\mathbf{p}'.\mathbf{x}'}{\hbar}\right)\psi_\alpha(\mathbf{x}')$$

10) Note que a unidade de $\psi_\alpha(\mathbf{x}')$ é $\frac{1}{L^{3/2}}$ enquanto a de $\psi_\alpha(x')$ é $\frac{1}{L^{1/2}}$

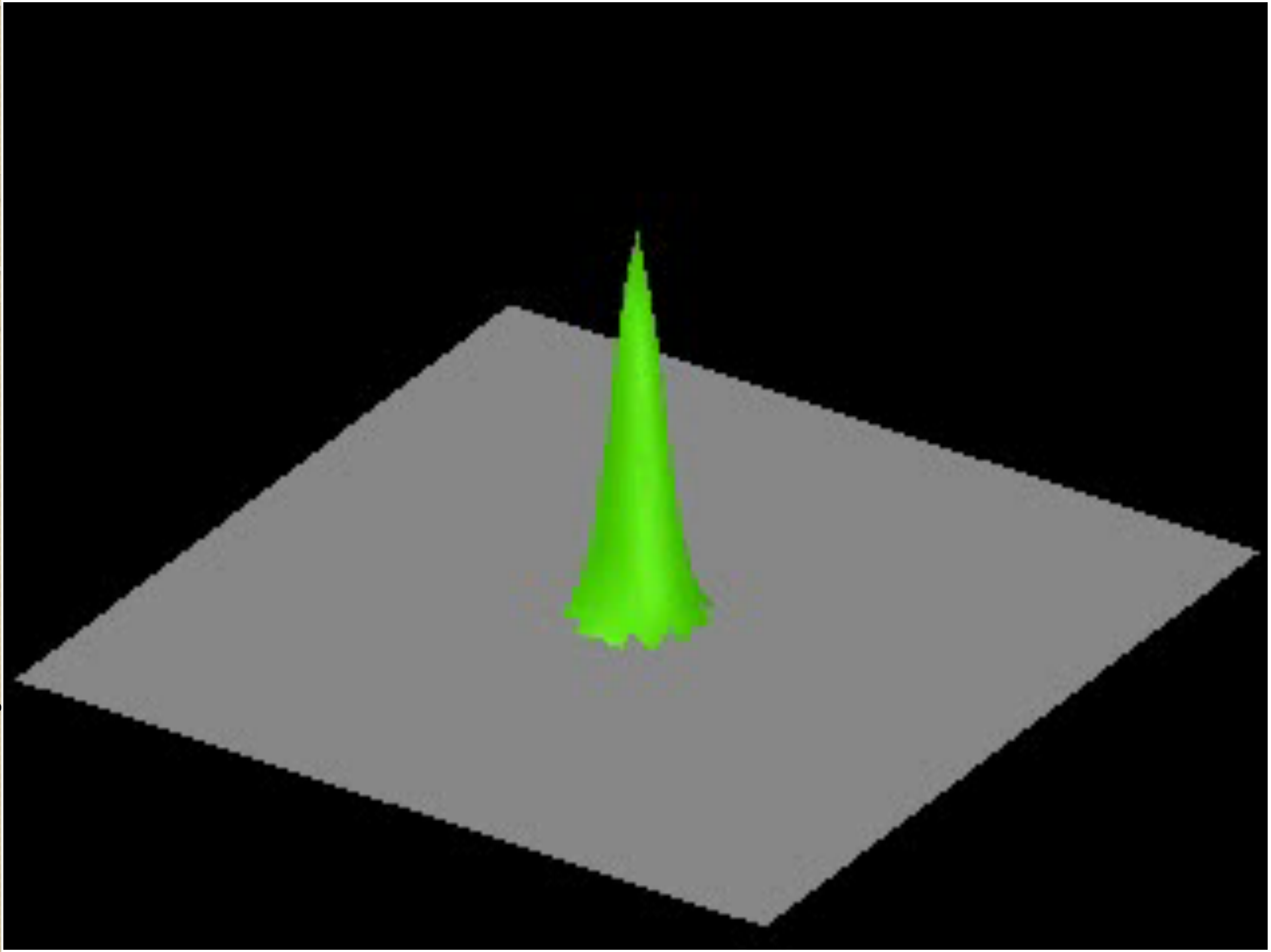
$\downarrow$

Pense em $|\psi_\alpha(\mathbf{x}')|^2 d^3x'$ *e em* $|\psi_\alpha(x')|^2 dx'$



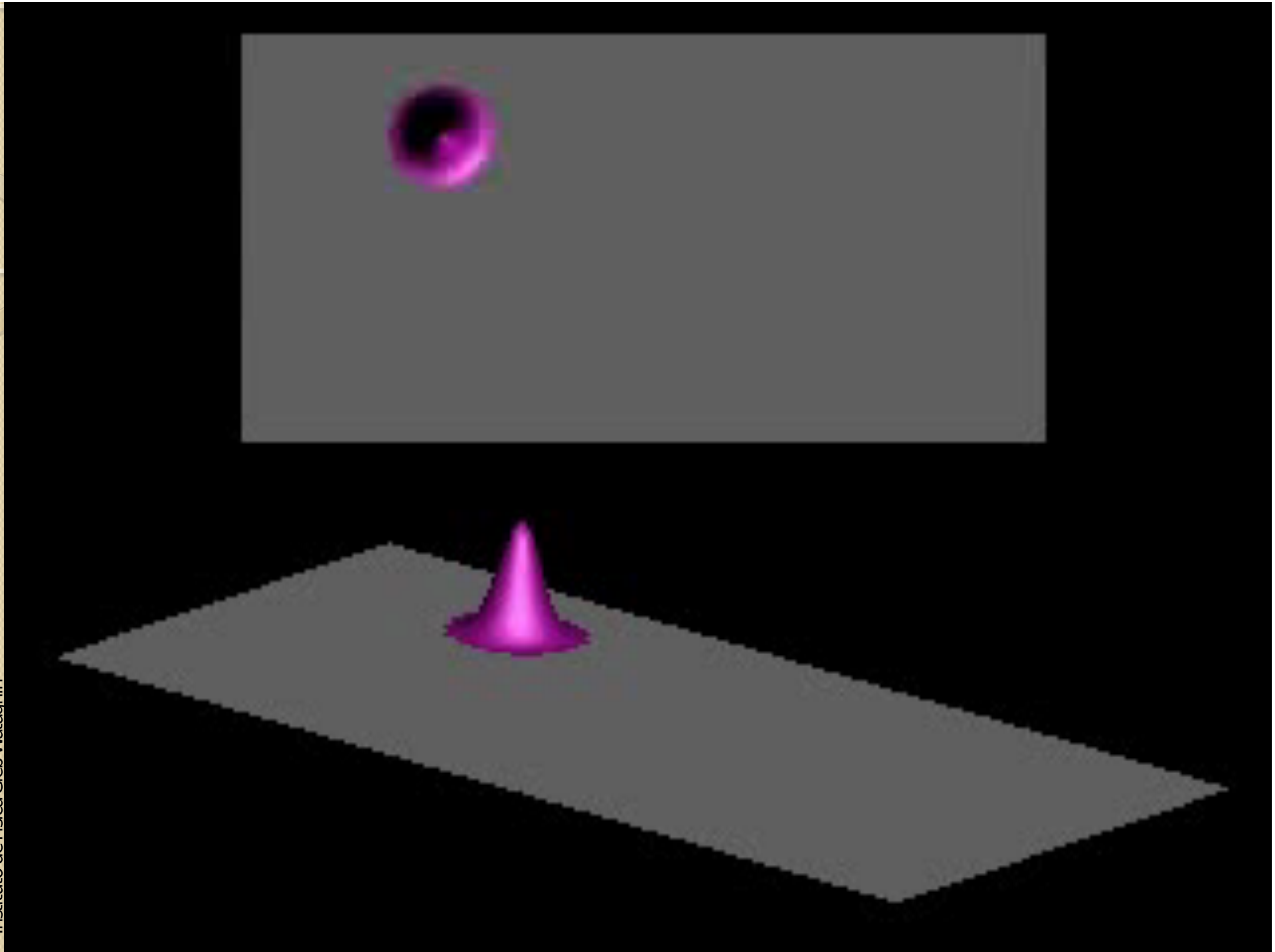
Partícula livre

Para ver as animações, visite: http://www.embd.be/quantummechanics/



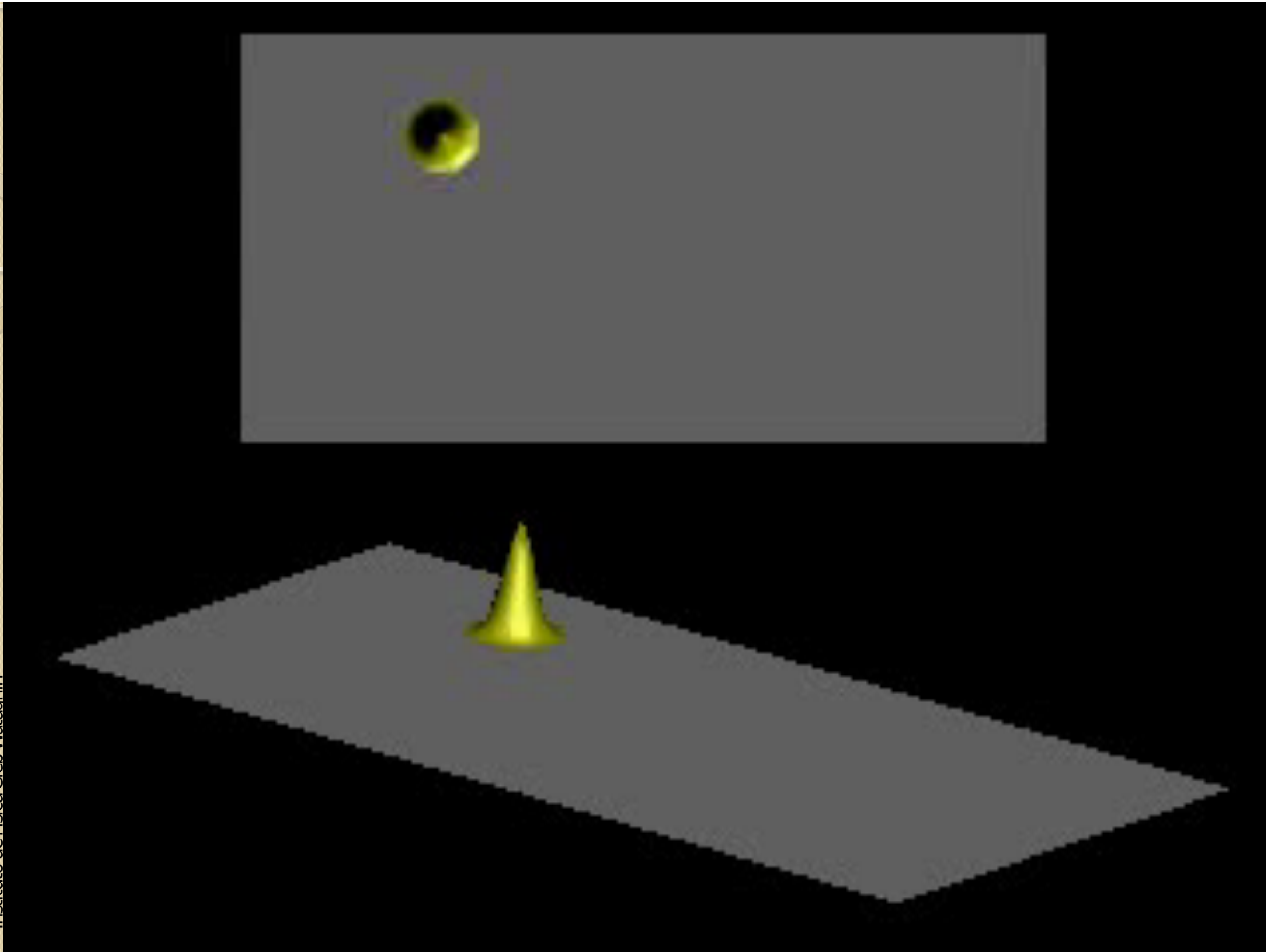
Partícula prisioneira na caixa

Para ver as animações, visite: **http://www.embd.be/quantummechanics/**



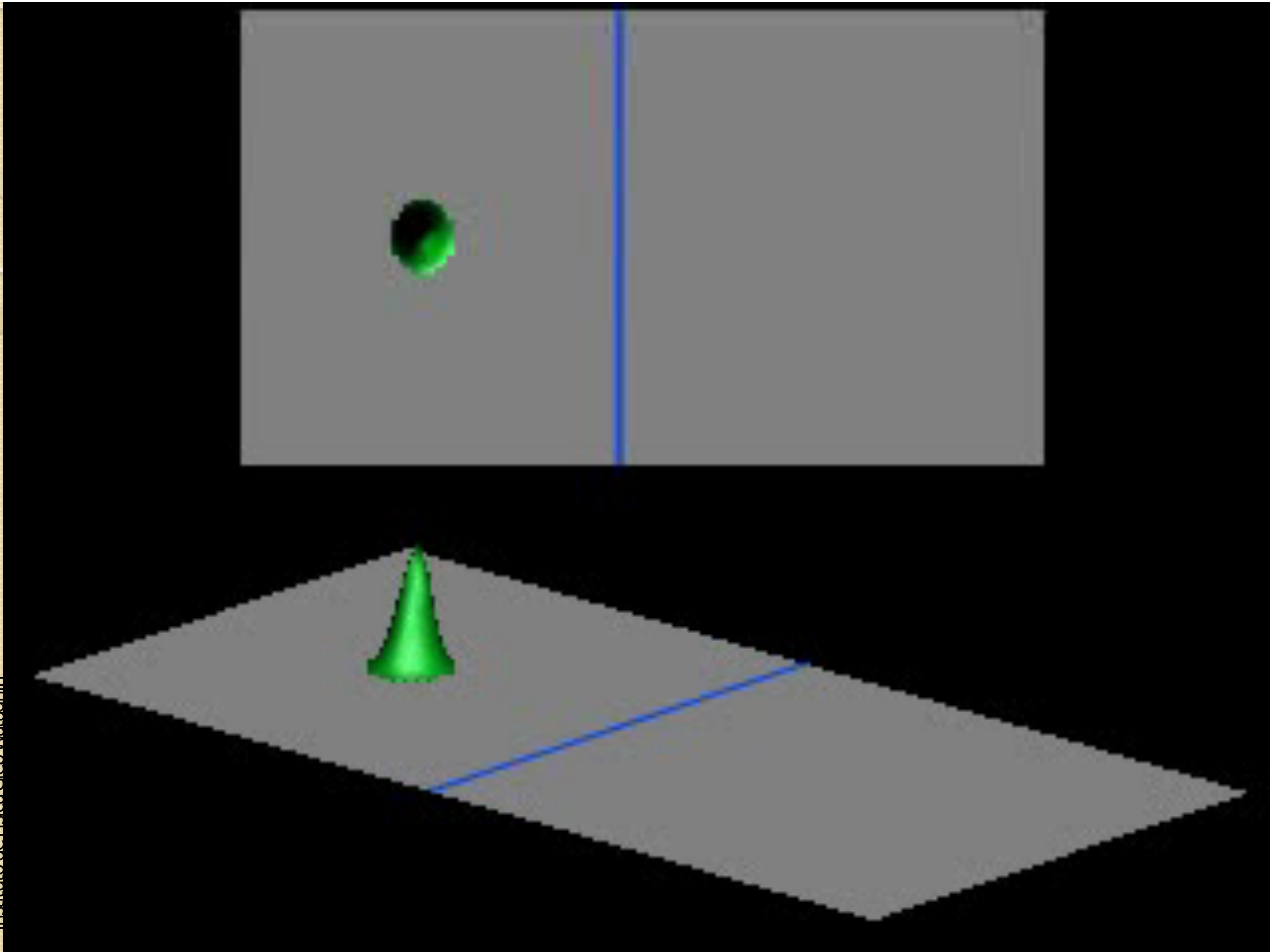
Partícula carregada em um campo magnético constante

Para ver as animações, visite: **http://www.embd.be/quantummechanics/**



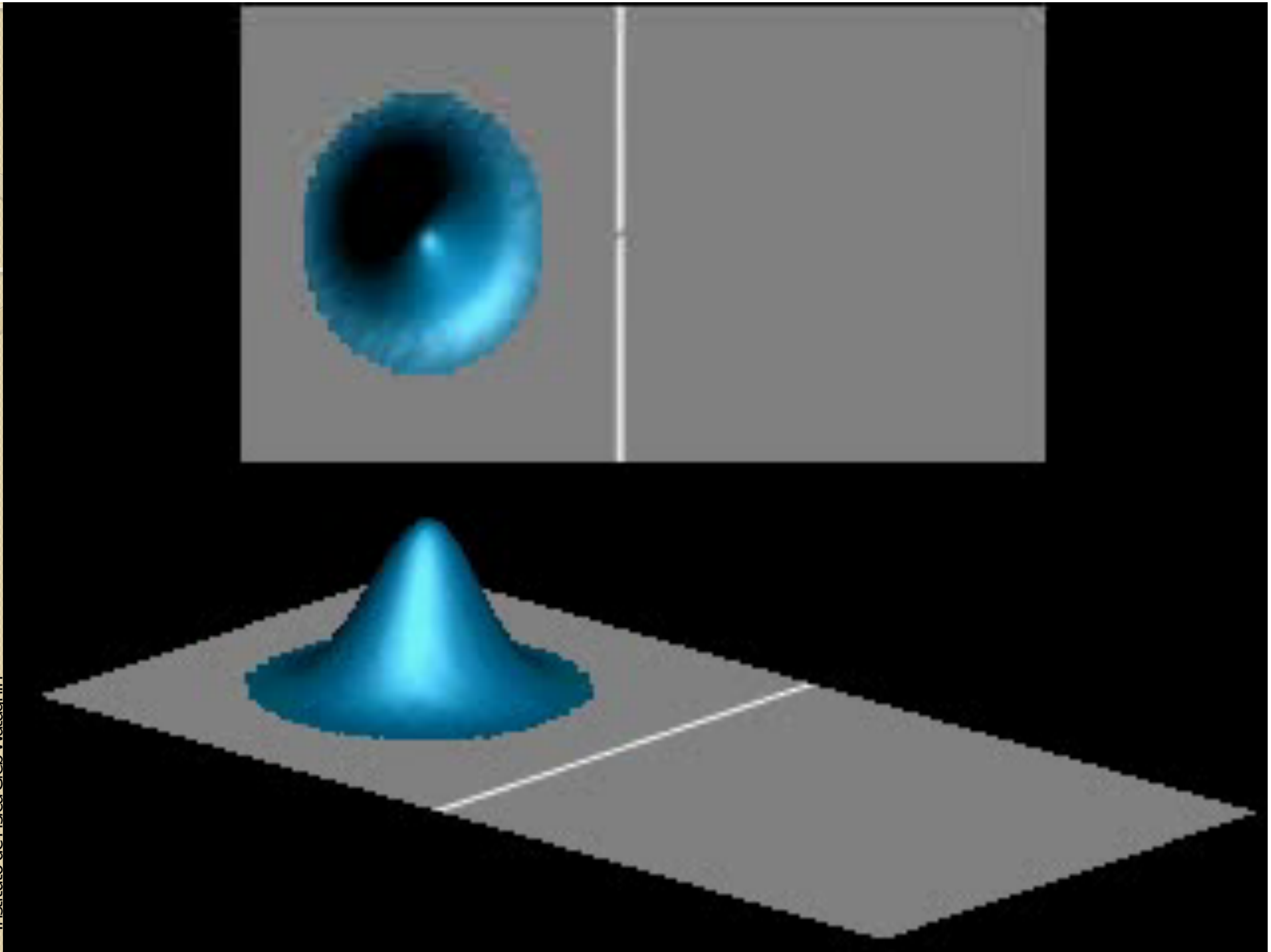
Partícula carregada na caixa em um campo magnético constante

Para ver as animações, visite: **http://www.embd.be/quantummechanics/**



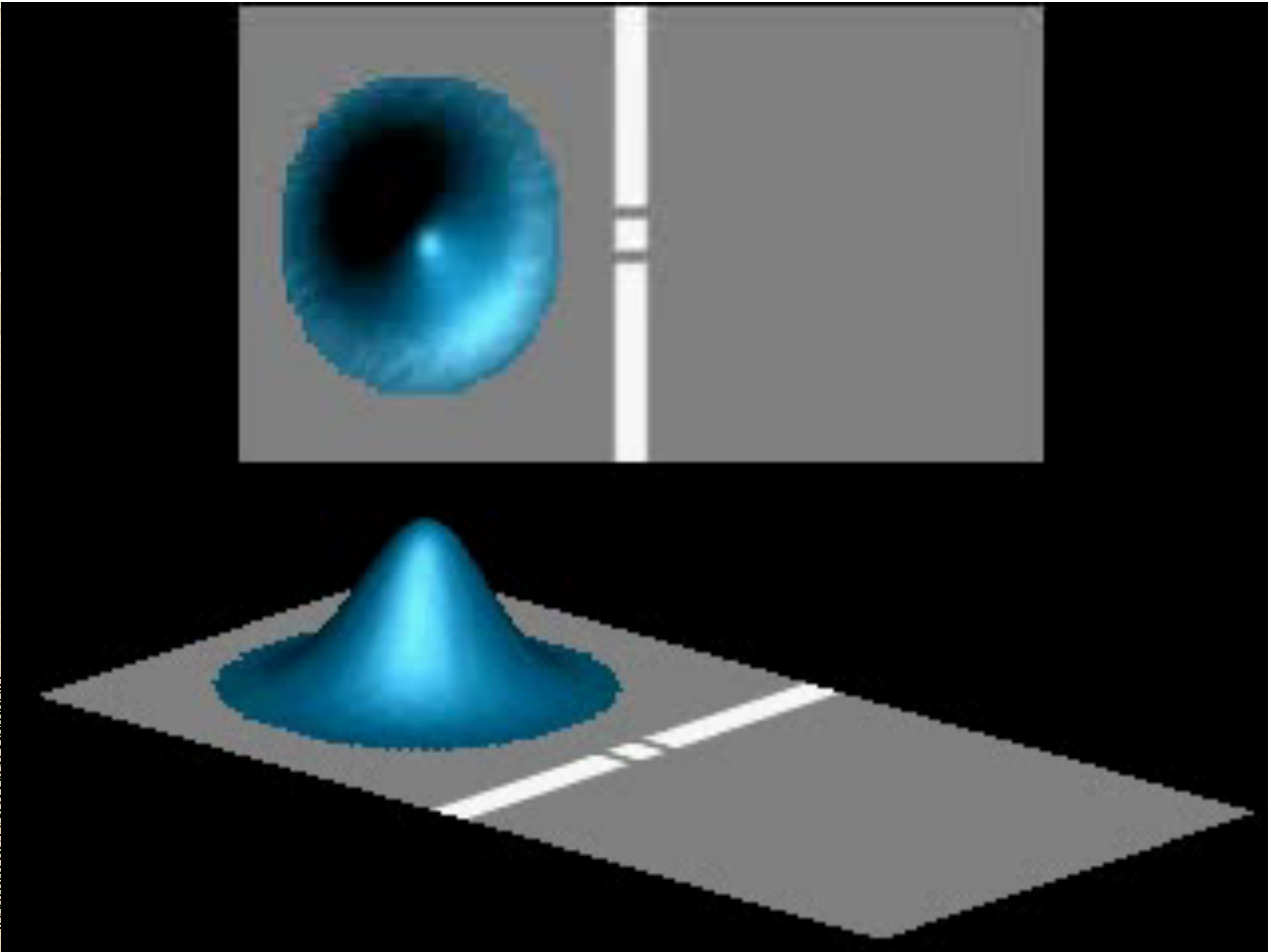
Efeito Túnel

Para ver as animações, visite: **http://www.embd.be/quantummechanics/**



Difração: uma fenda

Para ver as animações, visite: http://www.embd.be/quantummechanics/



Interferência – duas fendas

Para ver as animações, visite: **http://www.embd.be/quantummechanics/**

Capítulo 2: Dinâmica Quântica

Qual é análogo quântico da equação de Newton (ou de Lagrange ou de Hamilton)? Tem mais de uma forma de construí-lo?

Outras Perguntas equivalentes e/ou complementares

- Dissemos que toda a informação está no ket. Como o ket evolui no tempo?
- Se medimos a observável A e encontramos a', o sistema colapsa para o autoket correspondente. Que diferença tem medir B, imediatamente após a medida de A ou algum tempo depois?
- O que governa o futuro do ket? Tem análogo clássico?
- Em que circunstâncias que a descrição quântica coincide com a descrição clássica? Como conectar os dois cenários?
- Como proceder com observáveis que não tem análogo clássico?

Operador de Evolução Temporal

Na mecânica quântica, o tempo t é apenas um parâmetro. Não é um operador.

Em $t = t_0$, temos $|\alpha, t_0\rangle$. Entretanto, de um modo geral, em t, $|\alpha, t_0; t\rangle \neq |\alpha, t_0\rangle$.

Por definição, $\lim_{t \to t_0} |\alpha, t_0; t\rangle = |\alpha, t_0; t_0\rangle = |\alpha, t_0\rangle$.

Nossa tarefa é estudar a evolução $|\alpha, t_0\rangle = |\alpha\rangle \longrightarrow |\alpha, t_0; t\rangle$.

A busca de como o estado muda mediante o deslocamento temporal, induz a idéia de um operador $U(t, t_0)$, tal que $|\alpha, t_0; t\rangle = U(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle$.

Chamaremos $U(t, t_0)$ de operador de evolução temporal.

Que propriedades esperamos dele?

Propriedades do operador de evolução temporal

1)Unitário. Porque? É preciso conservar a norma. Em que sentido? Que tal

Note o papel da base completa
$$\begin{cases} |\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} C_{a'}(t_0)|a'\rangle \rightarrow \sum_{a'} |C_{a'}(t_0)|^2 = 1 \\ \text{Observe que, em geral } C_{a'}(t) \neq C_{a'}(t_0) \\ |\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'} C_{a'}(t)|a'\rangle \rightarrow \sum_{a'} |C_{a'}(t)|^2 = 1 \end{cases}$$

Para exemplificar, considere $|S_x, +\rangle$ em um campo magnético constante na direção z. A precessão no plano xy faz com que o estado mude de $|S_x, +\rangle$ para um misto de $|S_x, +\rangle$ com $|S_x, -\rangle$ e depois só $|S_x, -\rangle$ e assim por diante. Tudo isso ocorre, mas $|\langle S_x, +|\alpha, t_0; t\rangle|^2 + |\langle S_x, -|\alpha, t_0; t\rangle|^2 = 1$, ou ainda

$$\langle \alpha, t_0|\alpha, t_0\rangle = \langle \alpha, t_0; t|\alpha, t_0; t\rangle = 1, \qquad \forall\ t$$

Isso é garantido com $U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = 1$

Propriedades do operador de evolução temporal

2) $U(t_2,t_0) = \underbrace{U(t_2,t_1)U(t_1,t_0)}_{\text{leia da direita para a esquerda}},$ onde $(t_2 > t_1 > t_0)$

3) Deslocamentos infinitesimais $U(t_0+dt,t_0)|\alpha,t_0\rangle = |\alpha,t_0;t_0+dt\rangle,$ onde

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

4) Esperamos que o operador que ocasiona deslocamentos infinitesimais, seja em primeira ordem em $dt,$ ou seja

$$U(t_0+dt,t_0) = 1 - i\Omega dt$$

5) $\Omega^\dagger = \Omega$ é suficiente para garantir a unitaridade de $U(t_0+dt,t_0)$ em primeira ordem em $dt.$

Mostre que $\begin{cases} U(t_0+dt_1+dt_2,t_0) = U(t_0+dt_1+dt_2,t_0+dt_1)U(t_0+dt_1,t_0) \\ U^\dagger(t_0+dt,t_0)U(t_0+dt,t_0) = 1 \end{cases}$

em primeira ordem

Propriedades do operador de evolução temporal

De forma similar ao que fizemos com o operador de deslocamento no espaço, buscamos ajuda na mecânica clássica. O operador clássico que causa a evolução temporal (deslocamento no tempo) é a Hamiltoniana. A proposta é

$$U(t_0 + dt, t_0) = 1 - \frac{iHdt}{\hbar}$$

De novo, o $\hbar$ acerta as unidades. Lembre que $\hbar$ tem unidade de energia $\times$ tempo.

Poderíamos perguntar se a constante $\hbar$ do operador $\Im(dx') = 1 - \dfrac{ipdx'}{\hbar}$ é a mesma que aparece em $U(t_0 + dt, t_0) = 1 - \dfrac{iHdt}{\hbar}$? Veremos que sim.

Equação de Schrödinger

A propriedade de composição de deslocamentos temporais (propriedade 2), permite escrever $U(t+dt,t_0) = U(t+dt,t)U(t,t_0) = (1-\frac{iHdt}{\hbar})U(t,t_0)$, onde o intervalo entre t_0 e t não precisa ser infinitesimal. Reorganizando esta equação, temos

$$U(t+dt,t_0) - U(t,t_0) = -\frac{iHdt}{\hbar}U(t,t_0)$$

ou melhor

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

que no limite de dt indo a zero, fornece

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = HU(t,t_0),$$

a equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal.

Multiplique esta equação, pela direita, pelo ket independente de t, $|\alpha,t_0\rangle$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0)|\alpha,t_0\rangle = HU(t,t_0)|\alpha,t_0\rangle \longrightarrow \underbrace{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t_0;t\rangle = H|\alpha,t_0;t\rangle}_{\text{equação de Schrödinger convencional}}$$