Valor esperado do pacote de onda e Mecânica Clássica

Disciplina: FI001 - Mecânica Quântica

Aluno: Felipe M. Silva

Prof. Marco Aurélio P. Lima

[1]Universidade Estadual de Campinas

14 de abril de 2020

Derivadas de $\langle x \rangle$ e $\langle p \rangle$

- Na dinâmica de Heisenberg:

$$\frac{dA}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A, H] \tag{1}$$

- Com isso o valor esperado fica:

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle [A, H] \rangle \tag{2}$$

- Utilizando as relações:

$$[x_i, F(\mathbf{x}, \mathbf{p})] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial p_i}\ , \qquad [p_i, G(\mathbf{x}, \mathbf{p})] = -i\hbar \frac{\partial G}{\partial p_i} \tag{3}$$

- Seguem as equações:

$$\frac{d\langle x_i \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial p_i} \right\rangle\ , \qquad \frac{d\langle p_i \rangle}{dt} = -\left\langle \frac{\partial H}{\partial x_i} \right\rangle \tag{4}$$

Derivadas de $\langle x \rangle$ e $\langle p \rangle$ e a Mecânica Clássica

- Equações canônicas:

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}\,, \qquad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{5}$$

- Com isso podemos nos questionar se $\langle x \rangle$ e $\langle p \rangle$ evoluem como partículas clássicas, ou seja, se vale:

$$\frac{d\langle x_i \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial p_i} \right\rangle \stackrel{?}{=} \frac{\partial H}{\partial p_i}(\langle \mathbf{x} \rangle, \langle \mathbf{p} \rangle) \tag{6}$$

$$\frac{d\langle p_i \rangle}{dt} = -\left\langle \frac{\partial H}{\partial x_i} \right\rangle \stackrel{?}{=} -\frac{\partial H}{\partial x_i}(\langle \mathbf{x} \rangle, \langle \mathbf{p} \rangle) \tag{7}$$

- Ou ainda, se A é um observável vale $\langle A \rangle \stackrel{?}{=} A(\langle \mathbf{x} \rangle, \langle \mathbf{p} \rangle)$

Exemplo: Unidimensional, potencial $V_n = Kx^n$

- Potencial $V_n(x) = Kx^n$;
- Pacote de onda guassiano: $\langle x|\alpha\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}d^2} \exp\left[ikx - \frac{x^2}{2d^2}\right]$
- Daí,

$$\langle x\rangle = \frac{1}{\pi^{1/2}d}\int_{-\infty}^{+\infty} x' e^{-\frac{x'^2}{d^2}} dx' = 0 \quad \Rightarrow \quad V_n(\langle x\rangle) = 0$$

- Por outro lado,

$$\langle V_n\rangle = \frac{K}{\pi^{1/2}d}\int_{-\infty}^{+\infty} x'^n e^{-\frac{x'^2}{d^2}} dx' \begin{cases} = 0, & \text{se } n \text{ é ímpar} \\ \neq 0, & \text{se } n \text{ é par} \end{cases}$$

- Então: $\langle V_n\rangle = V_n(\langle x\rangle)$ para n ímpar e $\langle V_n\rangle \neq V_n(\langle x\rangle)$ para n par

Exemplo: Unidimensional, potencial $V = Kx^2$

- Caso n=2, $V(x) = Kx^2$
- Pacote de onda guassiano: $\langle x|\alpha\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}d^{1/2}} \exp\left[ikx - \frac{x^2}{2d^2}\right]$
- Daí,

$$\langle x\rangle = \frac{1}{\pi^{1/2}d}\int_{-\infty}^{+\infty} x' e^{-\frac{x'^2}{d^2}} dx' = 0 \quad \Rightarrow \quad V(\langle x\rangle) = 0$$

- Por outro lado,

$$\langle V\rangle = \frac{K}{\pi^{1/2}d}\int_{-\infty}^{+\infty} x'^2 e^{-\frac{x'^2}{d^2}} dx' = K\langle x^2\rangle = K\frac{d^2}{2}$$

- Observe que d mede a largura do pacote de onda, quanto menor d mais ”localizado”é o pacote de onda.
- Note que $d \to 0$ implica $\langle V\rangle = \frac{Kd^2}{2} \to V(\langle x\rangle)$

Caso: $f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$ para todo $x \approx x_0$

- Considere um observável $f(x)$ tal que vale a aproximação $f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$ para cada $x_0 - \frac{\Delta x}{2} < x < x_0 + \frac{\Delta x}{2}$;
- Função de onda localizada entre $x_0 - \frac{\Delta x}{2}$ e $x_0 + \frac{\Delta x}{2}$, ou seja,

$$\langle x|\alpha\rangle = \psi_\alpha(x) = 0, \text{ para } x < x_0 - \frac{\Delta x}{2} \text{ e } x > x_0 + \frac{\Delta x}{2} \tag{8}$$

- O valor esperado de x fica:

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x'|\psi_\alpha(x')|^2 dx' = \int_{x_0-\frac{\Delta x}{2}}^{x_0+\frac{\Delta x}{2}} x'|\psi_\alpha(x')|^2 dx' \tag{9}$$

- Daí,

$$f(\langle x\rangle) \approx f(x_0) + f'(x_0)(\langle x\rangle - x_0) = f(x_0) + f'(x_0)\left[\int_{x_0-\frac{\Delta x}{2}}^{x_0+\frac{\Delta x}{2}} x'|\psi_\alpha(x')|^2 dx' - x_0\right] \tag{10}$$

Caso: $f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$ para todo $x \approx x_0$

- Por outro lado:

$$
\begin{aligned}
\langle f \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(x')|\psi_\alpha(x')|^2 dx' = \int_{x_0-\frac{\Delta x}{2}}^{x_0+\frac{\Delta x}{2}} f(x')|\psi_\alpha(x')|^2 dx' \\
&\approx \int_{x_0-\frac{\Delta x}{2}}^{x_0+\frac{\Delta x}{2}} \left[f(x_0) + f'(x_0)(x' - x_0)\right]|\psi_\alpha(x')|^2 dx' \\
&\approx f(x_0) \int_{x_0-\frac{\Delta x}{2}}^{x_0+\frac{\Delta x}{2}} |\psi_\alpha(x')|^2 dx' + f'(x_0) \int_{x_0-\frac{\Delta x}{2}}^{x_0+\frac{\Delta x}{2}} (x' - x_0)|\psi_\alpha(x')|^2 dx' \\
&\approx f(x_0) + f'(x_0)(\langle x \rangle - x_0
\end{aligned}
\tag{11}
$$

- Assim, neste caso, temos $\langle f \rangle \approx f(\langle x \rangle)$;

Em geral ...

- Analogamente, se no espaço de momento a função de onda também é ”localizada”, temos $\langle g \rangle = g(\langle p \rangle)$;
- É importante lembrar que o princípio de incerteza para a posição e o momento impõe uma limitação no quão localizada pode ser a função de onda nas representações de posição e de momento simultaneamente.
- Em geral se o pacote de onda é bem localizado, então valem:

$$\frac{d\langle x_i \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial p_i} \right\rangle \approx \frac{\partial H}{\partial p_i}(\langle \mathbf{x} \rangle, \langle \mathbf{p} \rangle) \tag{12}$$

$$\frac{d\langle p_i \rangle}{dt} = -\left\langle \frac{\partial H}{\partial x_i} \right\rangle \approx -\frac{\partial H}{\partial x_i}(\langle \mathbf{x} \rangle, \langle \mathbf{p} \rangle) \tag{13}$$

$$\langle A \rangle \approx A(\langle x \rangle, \langle p \rangle) \tag{14}$$

- Neste caso a mecânica quântica leva à resultados clássicos.

Referências

- No terceiro capítulo do livro *Quantum Theory for Mathematicians* tem uma discussão sobre o assunto, e é discutido o exemplo de $V(x) = x^3 + x^2$.
  - HALL, Brian C. A First Approach to Quantum Mechanics. In: HALL, Brian C.. **Quantum Theory for Mathematicians**. Nova Iorque: Springer-verlag New York, 2013. Cap. 3. p. 53-90.
- O Capítulo 14 do livro do Ballentine faz uma discussão interessante sobre o limite clássico da Mecânica Quântica:
  - BALLENTINE, Leslie E. The Classical Limit. In: BALLENTINE, Leslie E.**Quantum Mechanics A Modern Development**. 2. ed. Simon Fraser University, Canada: World Scientific, 1998. Cap. 14. p. 389-404.
- Há também uma exposição interessante sobre o limite clássico da mecânica quântica nas notas de aula da disciplina F689 do prof. Marco Aurélio. Aula 15: ⟨https://www.ifi.unicamp.br/~maplima/f689/2016/aula15.pdf⟩