# F 689 – Mecânica Quântica I

2º Semestre de 2022
10/10/2022
Aula 14

# Aula passada

Observáveis $A$ e $B$ são compatíveis se $[A,B]=0$.

- Podem ser medidos um logo após o outro com resultados que **independem da ordem** das medidas.

Olhando só para o caso não degenerado, para simplificar (mas vale para o degenerado também).

Existe uma base de auto-valores simultâneos:

$$A\left|a_n,b_m\right\rangle = a_n\left|a_n,b_m\right\rangle$$
$$B\left|a_n,b_m\right\rangle = b_m\left|a_n,b_m\right\rangle$$

# Aula passada

Para um estado inicial genérico: $|\psi\rangle = \sum_{n,m} c_{n,m} |a_n, b_m\rangle$

$$1)\ A \to P_1(a_n) = \sum_m |c_{n,m}|^2; \quad |\psi_{1A}\rangle = \frac{\sum_m c_{n,m} |a_n, b_m\rangle}{\left[\sum_m |c_{n,m}|^2\right]^{1/2}}$$

$$2)\ B \to P_2(b_m) = \frac{|c_{n,m}|^2}{\sum_m |c_{n,m}|^2}; \quad |\psi_{2B}\rangle = |a_n, b_m\rangle$$

$$\boxed{\begin{array}{l} P_T = P_1(a_n) P_2(b_m) = |c_{n,m}|^2 \\ |\psi_f\rangle = |a_n, b_m\rangle \end{array}}$$

$$\Updownarrow$$

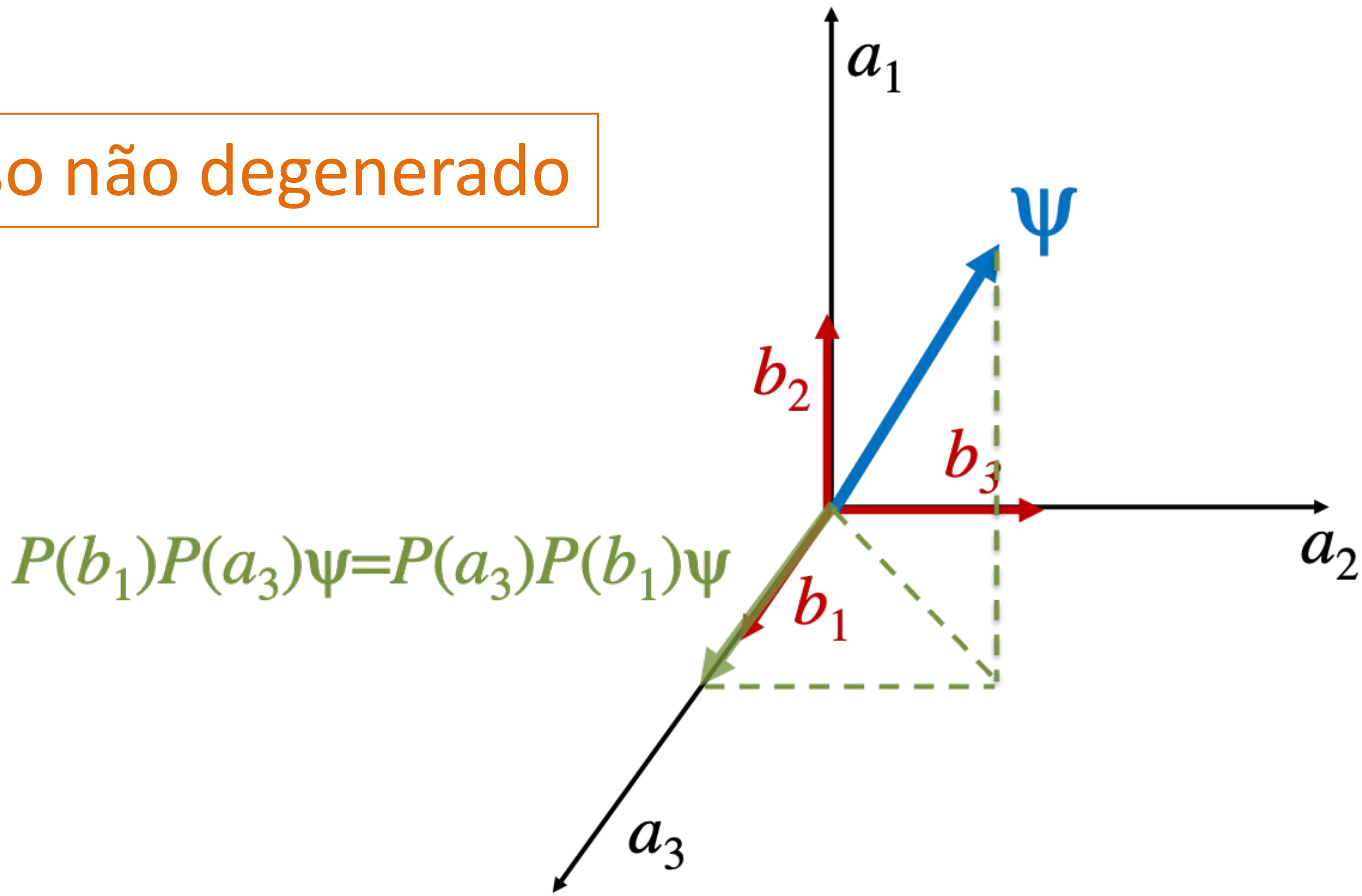
$$1)\ B \to P_1(b_m) = \sum_n |c_{n,m}|^2; \quad |\psi_{1B}\rangle = \frac{\sum_n c_{n,m} |a_n, b_m\rangle}{\left[\sum_n |c_{n,m}|^2\right]^{1/2}}$$

$$2)\ A \to P_2(a_n) = \frac{|c_{n,m}|^2}{\sum_n |c_{n,m}|^2}; \quad |\psi_{2A}\rangle = |a_n, b_m\rangle$$

$$\boxed{\begin{array}{l} P_T = P_1(b_m) P_2(a_n) = |c_{n,m}|^2 \\ |\psi_f\rangle = |a_n, b_m\rangle \end{array}}$$

# Aula passada

Caso não degenerado

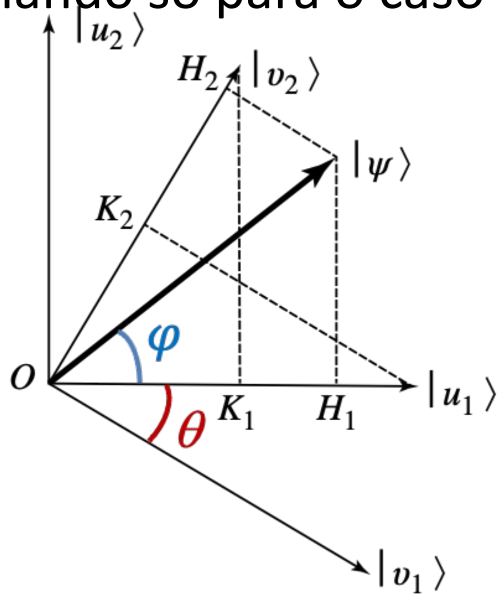


# Aula passada

Observáveis $A$ e $B$ **não** são compatíveis se $[A,B]\neq 0$.

- **Não** podem ser medidos um logo após o outro com resultados que independem da ordem das medidas.

Olhando só para o caso em duas dimensões, para simplificar.




$$1)\ A(a_1)\,,\text{depois }B(b_2)\to P(a_1,b_2)=\cos^2\varphi\sin^2\theta;\ \ |\psi_f\rangle=|v_2\rangle$$

$$2)\ B(b_2)\,,\text{depois }A(a_1)\to P(b_2,a_1)=\sin^2(\theta+\varphi)\sin^2\theta;\ \ |\psi_f\rangle=|u_1\rangle$$

# Aula passada

$$\boxed{i\hbar \frac{d\left|\psi\left(t\right)\right\rangle}{dt} = H\left(t\right)\left|\psi\left(t\right)\right\rangle}$$

Equação de Schrödinger

1. Linearidade:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_1\left(\mathbf{r},t\right)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2\psi_1\left(\mathbf{r},t\right) + V\left(\mathbf{r},t\right)\psi_1\left(\mathbf{r},t\right)$$
$$i\hbar \frac{\partial \psi_2\left(\mathbf{r},t\right)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2\psi_2\left(\mathbf{r},t\right) + V\left(\mathbf{r},t\right)\psi_2\left(\mathbf{r},t\right)$$

$$\psi\left(\mathbf{r},t\right) = \lambda_1\psi_1\left(\mathbf{r},t\right) + \lambda_2\psi_2\left(\mathbf{r},t\right) \Rightarrow \; i\hbar \frac{\partial \psi\left(\mathbf{r},t\right)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2\psi\left(\mathbf{r},t\right) + V\left(\mathbf{r},t\right)\psi\left(\mathbf{r},t\right)$$

2. Primeira ordem na derivada temporal: a única condição inicial requerida é a função de onda no instante inicial (não precisa de suas derivadas temporais no instante inicial)

$$\psi\left(\mathbf{r},t_0\right) \Rightarrow \psi\left(\mathbf{r},t\right), \text{para todo } t \neq t_0$$

# Aula passada

3. Invariância da norma: conservação da probabilidade total de encontrar a partícula em algum lugar no espaço (lei de conservação global)

$$\langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle = 1 \Rightarrow \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1, \text{para todo } t \neq t_0$$

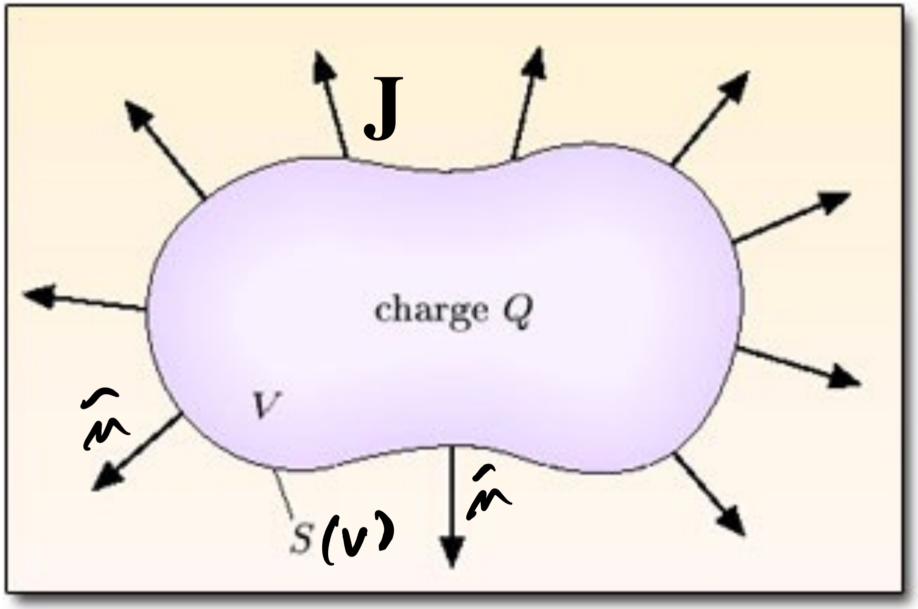
EVOLUÇÃO UNITÁRIA DO ESTADO.

$$\int d^3r\, \rho(\vec{r},t) = \int d^3r\, |\psi(\vec{r},t)|^2$$

# Conservação local da probabilidade

Conservação local da carga elétrica:

$$\int_{S(V)} \mathbf{J}_c \cdot \hat{\mathbf{n}} dS = -\frac{dQ(V)}{dt}$$




FORMA DIFERENCIAL:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_c + \frac{\partial \rho_c}{\partial t} = 0$$

INTEGRO EM V:

$$\int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_c \, d^3r = \int_{S(V)} \vec{J}_c \cdot \hat{n} \, dS \quad \text{(GAUSS)}$$

$$\int_V \frac{\partial \rho_c}{\partial t} d^3r = \frac{d}{dt}\left[\int_V \rho_c \, d^3r\right] = \frac{d}{dt} Q(V)$$

NA MECÂNICA QUÂNTIC:

$$\rho(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r},t)\,\psi(\mathbf{r},t) \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t) = \frac{\partial}{\partial t}\left[\psi^*(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t)\right] = \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (2)$$

TOMANDO $(1)^*$:

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V\psi^* \quad (3)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + \cancel{V\psi^*}\right]\psi + \psi^*\left(\frac{1}{i\hbar}\right)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + \cancel{V\psi}\right]$$

$$= -\frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right]$$

DEFINIMOS : $\vec{J}(\vec{r},t) \equiv \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right)$

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi}\left[\cancel{(\vec{\nabla}\psi^*)\cdot(\vec{\nabla}\psi)} + \psi^*\nabla^2\psi - \cancel{(\vec{\nabla}\psi)\cdot(\vec{\nabla}\psi^*)} - \psi\nabla^2\psi^*\right]$$

$$= \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right] = -\frac{\partial\rho}{\partial t}$$

$$\Rightarrow \boxed{\vec{\nabla}\cdot\vec{J} + \frac{\partial\rho}{\partial t} = 0}$$

LEI DE CONSERVAÇÃO <u>LOCAL</u> DA PROBABILIDADE

$\vec{J}(\vec{r},t) \equiv$ DENSIDADE VOLUMÉTRICA DE <u>CORRENTE</u> DE PROBABILIDADE

$$\Rightarrow \int_{S(V)} \vec{J}\cdot\hat{n}\, dS = -\frac{dP(V)}{dt} \qquad P(V) = \int_V \rho(\vec{r},t)\, d^3r$$

EXEMPLO: ONDA PLANA

$$\psi(\vec{r},t) = A\, e^{+i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega_k t)}$$

$$\omega_k = \frac{E_k}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

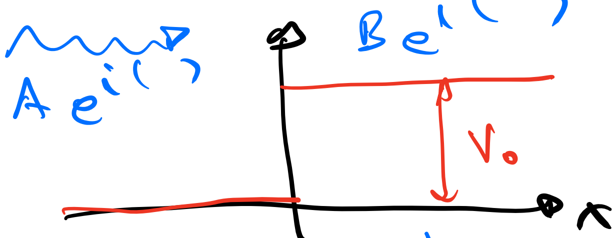
$$\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t) = (i\vec{k})\, A\, e^{+i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega_k t)}$$

$$\rho(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2 = |A|^2$$

$$\vec{J}(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{2m\cancel{i}}\left[A^* e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega_k t)}\,(\cancel{i}\vec{k})\, A\, e^{i(\;\;)} + \cancel{i}\,\vec{k}\,|A|^2\right]$$

$$= \left(\frac{\hbar\vec{k}}{m}\right)|A|^2 = \frac{\vec{p}}{m}|A|^2 = \vec{v}\,|A|^2 = \vec{v}\,\rho(\vec{r},t)$$

ISSO JUSTIFICA QUE, NO POTENCIAL DEGRAU:




$$T = \frac{(k')^2}{k^2}\,\frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{J'}{J}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad k' = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

TEOREMA DE POYNTING:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{S} + \frac{\partial \rho_e}{\partial t} = 0$$

$$\vec{S} = \frac{1}{\mu_0} \vec{E} \times \vec{B}$$

$$\rho_e = \frac{\varepsilon_0}{2} |E|^2 + \frac{1}{2\mu_0} |\vec{B}|^2$$

# Evolução temporal de valores esperados

SEJA UM OPERADOR $A(t)$, QUE PODE DEPENDER EXPLICITAMENTE DO TEMPO: $A = X$, $A = P_x$ OU

$A(t) = X \cos \omega t$

CONSIDERE O VALOR ESPERADO: $\langle A \rangle(t) = \langle \psi(t) | A(t) | \psi(t) \rangle$

$$\frac{d\langle A\rangle(t)}{dt} = \frac{d}{dt}\left[\langle \psi(t)|A(t)|\psi(t)\rangle\right] = \underbrace{\left(\frac{d\langle\psi(t)|}{dt}\right)}_{-\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H(t)} A(t)|\psi(t)\rangle$$

$$+ \langle\psi(t)|A(t)\underbrace{\left(\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}\right)}_{\frac{1}{i\hbar}H(t)|\psi(t)\rangle} + \langle\psi(t)|\frac{\partial A}{\partial t}|\psi(t)\rangle$$

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

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

# Teorema de Ehrenfest

TEOREMA DE EHRENFEST: $H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R})$

COORDENADA $\underline{X}$:

$$\frac{d\langle X\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle [X,H]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle \left[X, \frac{\vec{P}^2}{2m}\right]\right\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle \underbrace{\left[X, \frac{P_x^2}{2m}\right]}_{\frac{i\hbar}{m}P_x \text{ (LISTA 2a)}} \rangle$$

$$\frac{d\langle X\rangle}{dt} = \frac{\langle P_x\rangle}{m} \Rightarrow \boxed{\frac{d\langle \vec{R}\rangle}{dt} = \frac{1}{m}\langle \vec{P}\rangle} \quad (4)$$

MOMENTO $P_x$:

$$\frac{d}{dt}\langle P_x\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [P_x,H]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle \underbrace{[P_x, V(\vec{R})]}_{-i\hbar\frac{\partial V(\vec{R})}{\partial x} \text{ (LISTA 2a)}}\rangle$$

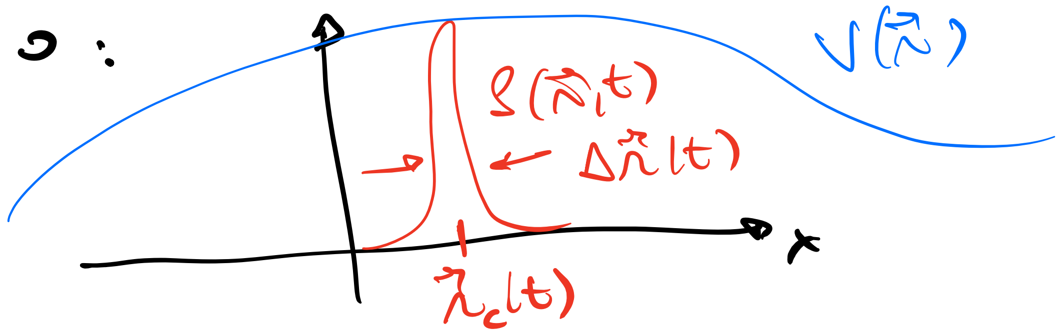
$$\frac{d\langle P_x\rangle}{dt} = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle \Rightarrow \boxed{\frac{d\langle \vec{P}\rangle}{dt} = -\langle \vec{\nabla}V(\vec{R})\rangle} \quad (5)$$

COMPARE COM AS EQS. DE HAMILTON:

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

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\vec{\nabla} V(\vec{r}) = \vec{F}(\vec{r}) = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}}$$

DE FATO, SE $\psi(\vec{r},t)$ É FORTEMENTE LOCALIZADO NO ESPAÇO:




$|\Delta\vec{r}(t)| << \hbar / |\vec{\nabla} V| \Delta t$

$$\langle \vec{R} \rangle = \int \vec{r}\, \rho(\vec{r},t)\, d^3r \cong \vec{r}_c(t)$$

$$\langle -\vec{\nabla} V(\vec{R}) \rangle = \int \left(-\vec{\nabla} V(\vec{r})\right) \rho(\vec{r},t)\, d^3r \cong -\vec{\nabla} V \Big|_{\vec{r}=\vec{r}_c(t)}$$

DO TEOREMA DE EHRENFEST:

$$m\frac{d\langle\vec{R}\rangle}{dt} \cong \frac{d\vec{r}_c(t)}{dt} = \langle\vec{p}\rangle \qquad \frac{d\langle\vec{p}\rangle}{dt} \cong -\vec{\nabla}V\Big|_{\vec{r}=\vec{r}_c(t)}$$

DERIVANDO A 1ª NO TEMPO:

$$m\frac{d^2\vec{r}_c(t)}{dt} = \frac{d}{dt}\langle\vec{p}\rangle = -\vec{\nabla}V\Big|_{\vec{r}=\vec{r}_c(t)} = \vec{F}(\vec{r}_c(t))$$

SOB AS CONDIÇÕES ASSUMIDAS, A DINÂMICA DO CENTRO DO PACOTE DE ONDAS É A DA MECÂNICA CLÁSSICA.

# Sistemas conservativos

Sistemas conservativos: energia potencial independente do tempo $V(\mathbf{r})$

$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R})$

1. Solução geral da eq. de Schrödinger na base de auto-estados de $H$:

SEJAM OS AUTO-ESTADOS DE H:

$H|\varphi_{n,\tau}\rangle = E_n|\varphi_{n,\tau}\rangle \qquad \langle\varphi_{n',\tau'}|\varphi_{n,\tau}\rangle = \delta_{n,n'}\delta_{\tau,\tau'}$

OS ÍNDICES $\underline{\tau}$ DISTINGUEM OS VÁRIOS AUTO-ESTADOS DEGENERADOS. QUALQUER ESTADO $|\psi(t)\rangle$ PODE SER EXPANDIDO NESSA BASE:

$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,\tau} c_{n,\tau}(t)\,|\varphi_{n,\tau}\rangle \qquad c_{n,\tau}(t) = \langle\varphi_{n,\tau}|\psi(t)\rangle$

LEVANDO NA E.S.:

$\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \sum_{n,\tau} \dot{c}_{n,\tau}(t)\,|\varphi_{n,\tau}\rangle$ ONDE $\dot{c}_{n,\tau}(t) = \frac{dc_{n,\tau}(t)}{dt}$

$H|\psi(t)\rangle = \sum_{n,\tau} c_{n,\tau}(t)\,H|\varphi_{n,\tau}\rangle = \sum_{n,\tau} E_n c_{n,\tau}(t)|\varphi_{n,\tau}\rangle$

COMO $\{|\varphi_{n,\tau}\rangle\}$ FORMAM UMA BASE ORTONORMAL:

$$i\hbar\,\dot{C}_{n,\tau}(t) = E_n C_{n,\tau}(t)$$

SOLUÇÃO: $C_{n,\tau}(t) = e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}\,C_{n,\tau}(t_0) \quad \forall\, t$

O QUE ME DÁ A SOLUÇÃO DA E.S. PROCURADA:

1) DADO O ESTADO INICIAL EM $t_0$, $|\psi(t_0)\rangle$, ACHO OS COEFICIENTES:

$$C_{n,\tau}(t_0) = \langle\varphi_{n,\tau}|\psi(t_0)\rangle$$

2) PARA $t \neq t_0$:

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

3) VALE PARA ESPECTRO CONTÍNUO:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\tau}\int dE\; C_\tau(E,t_0)\,e^{-iE(t-t_0)/\hbar}\,|\varphi_{E,\tau}\rangle; \quad C_\tau(E,t_0) = \langle\varphi_{E,\tau}|\psi(t_0)\rangle$$

# Exemplo

Base: $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$

Hamiltoniano: $H = E\begin{pmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 2 & 0 \\ i & 0 & 2 \end{pmatrix}$

Estado inicial:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{2}|2\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle$$

Os auto-vetores e auto-valores são:

$$|E_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - i|3\rangle), \quad (E_1 = E)$$

$$|E_2\rangle = |2\rangle, \quad (E_2 = 2E)$$

$$|E_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + i|3\rangle), \quad (E_3 = 3E)$$

Obtenha o estado num instante qualquer $t$: $|\psi(t)\rangle$

1) EXPANDO $|\psi(0)\rangle$ NA BASE $\{|E_i\rangle\}$ : $\langle E_i|\psi(0)\rangle$

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{2}\left[\left(1+\frac{i}{\sqrt{2}}\right)|E_1\rangle + |E_2\rangle + \left(1-\frac{i}{\sqrt{2}}\right)|E_3\rangle\right]$$

2) $$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2}\left[\left(1+\frac{i}{\sqrt{2}}\right)e^{-iEt/\hbar}|E_1\rangle + e^{-2iEt/\hbar}|E_2\rangle + \left(1-\frac{i}{\sqrt{2}}\right)e^{-3iEt/\hbar}|E_3\rangle\right]$$

3) SE QUISER $|\psi(t)\rangle$ NA BASE $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$

FAÇA A MUDANÇA:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2}\left[\left(1+\frac{i}{\sqrt{2}}\right)e^{-iEt/\hbar}\frac{\left(|1\rangle - i|3\rangle\right)}{\sqrt{2}} + e^{-2iEt/\hbar}|2\rangle + \left(1-\frac{i}{\sqrt{2}}\right)e^{-3iEt/\hbar}\left(\frac{|1\rangle + i|3\rangle}{\sqrt{2}}\right)\right]$$