F 689 – Mecânica Quântica I

2º Semestre de 2022

17/10/2022

Aula 15

Aula passada

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

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

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

4. Conservação local da probabilidade: a probabilidade muda como um fluido e se conserva localmente; ela só pode mover de um ponto para outro se se mover com velocidade finita entre eles.

$$\boxed{\frac{\partial \rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r},t) = 0}$$

$$\rho(\mathbf{r},t) = \left|\psi(\mathbf{r},t)\right|^2$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r},t) = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\nabla}\psi(\mathbf{r},t) - \psi(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\nabla}\psi^*(\mathbf{r},t)\right]$$

Aula passada

5. Evolução temporal de valores esperados:

$\langle A(t) \rangle = \langle \psi(t) | A(t) | \psi(t) \rangle$

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

6. Teorema de Ehrenfest (exato):

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R}) \Rightarrow \begin{cases} \dfrac{d\langle \mathbf{R} \rangle}{dt} = \dfrac{\langle \mathbf{P} \rangle}{m} \\ \dfrac{d\langle \mathbf{P} \rangle}{dt} = -\langle \boldsymbol{\nabla} V(\mathbf{R}) \rangle \end{cases}$$

Se a função de onda é muito localizada (largura muito menor que as variações espaciais típicas do potencial), recuperamos as equações clássicas (de Hamilton) para o centro do pacote (aproximado).

$$\begin{cases} \dfrac{d\langle \mathbf{R} \rangle}{dt} = \dfrac{\langle \mathbf{P} \rangle}{m} \\ \dfrac{d\langle \mathbf{P} \rangle}{dt} = -\langle \boldsymbol{\nabla} V(\mathbf{R}) \rangle \end{cases} \Rightarrow m\frac{d^2\mathbf{r}_c}{dt^2} = -\left.\boldsymbol{\nabla} V(\mathbf{r})\right|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_c(t)} = \mathbf{F}[\mathbf{r}_c(t)]$$

Aula passada

Sistemas conservativos: $V(\mathbf{r})$ e, portanto, H não dependem do tempo

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

Solução geral da Equação de Schrödinger na base de auto-estados de H:

$$H\left|\varphi_{n\tau}\right\rangle=E_n\left|\varphi_{n\tau}\right\rangle,\ \left(\tau=1,2,\ldots,g_n\right)$$

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

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

Estados estacionários

SE O ESTADO INICIAL PERTENCE A UM AUTO-SUB-ESPAÇO DE H:

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_r c_{n,r}(t_0)\,|\varphi_{n,r}\rangle$$

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = \sum_r c_{n,r}(t_0)\, e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}\,|\varphi_{n,r}\rangle$$

$$= e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \underbrace{\sum_r c_{n,r}(t_0)\,|\varphi_{n,r}\rangle}_{|\psi(t_0)\rangle} = e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}\,|\psi(t_0)\rangle$$

COMO $e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}$ É UMA FASE GLOBAL SEM CONSEQUÊNCIA FÍSICA : $|\psi(t)\rangle = |\psi(t_0)\rangle \Rightarrow$ ESTADO ESTACIONÁRIO

SUAS PROPRIEDADES FÍSICAS NÃO MUDAM COM O TEMPO.

Constantes do movimento

ANALOGAMENTE À MEC. CLÁSSICA, NA MEC. QUÂNTICA HÁ OBSERVÁVEIS QUE SÃO CONSERVADOS: CONSTANTES DO MOVIMENTO. UM OBSERVÁVEL É CONST. DO MOVIMENTO SE:

1) $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$ (NÃO DEPENDE EXPLICITAMENTE DO TEMPO)

2) $[A, H] = 0$ (COMUTAM COM O HAMILTONIANO)

CONSEQUÊNCIAS: SE $\underline{A}$ SATISFAZ (1) E (2)

(i) $$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \Big\langle \underbrace{\cancel{\frac{\partial A}{\partial t}}}_{0} \Big\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle [\underbrace{\cancel{A, H}}_{0}] \rangle = 0 \Rightarrow \langle A \rangle = \text{CONST.}$$

$$\langle A \rangle = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle$$

(iii) SE $[A,H]=0$, EXISTE UMA BASE DE AUTO-VETORES COMUNS A $\underline{A}$ E $\underline{H}$:

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

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

$\underline{r}$ É O ÍNDICE QUE DISTINGUE OS $|\varphi_{n,p,r}\rangle$ COM O MESMO $\underline{n}$ E p, CASO $\underline{A}$ E $\underline{H}$ NÃO FORMEM UM CCOC.

CONSIDERE UM ESTADO ESTACIONÁRIO, QUE TAMBÉM SEJA AUTO-VETOR DE $\underline{A}$:

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_r c_r|\varphi_{n,p,r}\rangle$$

$$A|\psi(t_0)\rangle = \sum_r c_r A|\varphi_{n,p,r}\rangle = a_p\underbrace{\left[\sum_r c_r|\varphi_{n,p,r}\rangle\right]}_{|\psi(t_0)\rangle}$$

$|\psi(t_0)\rangle$ É AUTO-VETOR DE $\underline{A}$

PARA $t\neq t_0$: $\quad |\psi(t)\rangle = \sum_r c_r e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}|\varphi_{n,p,r}\rangle = e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}|\psi(t_0)\rangle$

ASSIM, PARA $t \neq t_0$:

$$A|\psi(t)\rangle = A\left[e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}\right]|\psi(t_0)\rangle$$

$$= a_p|\psi(t)\rangle$$

SE O ESTADO ESTACIONÁRIO INICIAL É AUTO-ESTADO DE $\underline{A}$, ELE PERMANECE AUTO-ESTADO DE $\underline{A}$ (COM O MESMO AUTO-VALOR) PARA $t \neq t_0$.

POR ISSO, OS AUTO-VALORES DE $\underline{A}$ SÃO CHAMADOS DE BONS NÚMEROS QUÂNTICOS.

iii) AS VÁRIAS PROBABILIDADES DE MEDIDAS DE A NO ESTADO $|\psi(t)\rangle$ NÃO DEPENDEM DO TEMPO:

PROVA: EXPANDO $|\psi(t)\rangle$ NA BASE DE AUTO-ESTADOS COMUNS:

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

$$P(a_p,t) = \sum_{n,\tau} |\langle \varphi_{n,p,\tau}|\psi(t)\rangle|^2$$

$$= \sum_{n,\tau} |C_{n,p,\tau}(t_0)\, e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}|^2$$

$$= \sum_{n,\tau} |C_{n,p,\tau}(t_0)|^2 = P(a_p,t_0)$$ QUE NÃO DEPENDE DO TEMPO.

(ii) $\langle A\rangle = \sum_p a_p P(a_p,t) = \sum_p a_p P(a_p,t_0)$ INDEPENDENTE DO TEMPO

$\langle A^2\rangle = \sum_p a_p^2 P(a_p,t) = \sum_p a_p^2 P(a_p,t_0) \Rightarrow \Delta A$ TAMBÉM INDEPENDE DO TEMPO.

Frequências de Bohr

SUPONHA AGORA UM OBSERVÁVEL $\underline{B}$ QUE $\underline{\text{NÃO}}$ COMUTA COM $\underline{H}$: $[B,H]\neq 0$.

SEJA UM ESTADO QUALQUER:

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

ONDE $H|\varphi_{n,\tau}\rangle = E_n|\varphi_{n,\tau}\rangle$

$$\langle B\rangle(t) = \langle\psi(t)|B|\psi(t)\rangle = \left[\sum_{n',\tau'} c^*_{n',\tau'}(t_0)\, e^{iE_{n'}(t-t_0)/\hbar}\langle\varphi_{n',\tau'}|\right]$$

$$B\left[\sum_{n,\tau} c_{n,\tau}(t_0)\, e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}\,|\varphi_{n,\tau}\rangle\right] =$$

$$= \sum_{\substack{n,\tau\\ n',\tau'}} \underbrace{c^*_{n',\tau'}(t_0)\, c_{n,\tau}(t_0)}\, e^{-i(E_n-E_{n'})(t-t_0)/\hbar}\, \underbrace{\langle\varphi_{n',\tau'}|B|\varphi_{n,\tau}\rangle}_{B_{n,n',\tau,\tau'}} =$$

$$= \sum_{\substack{n z \\ n', z'}} B_{n n' z z'} \underbrace{e^{-i(E_n - E_{n'})(t-t_0)/\hbar}}_{\text{DEPENDÊNCIA TEMPORAL}}$$

$\langle B \rangle (t)$ É UMA SOMA DE EXPONENCIAIS OSCILATÓRIAS CUJAS FREQUÊNCIAS DE OSCILAÇÃO SÃO:

$$\omega_{n,n'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} \quad ; \quad \nu_{n,n'} = \frac{\omega_{n,n'}}{2\pi} = \frac{E_n - E_{n'}}{h}$$

FREQUÊNCIAS DE BOHR: PROPORCIONAIS ÀS DIFERENÇAS ENTRE AS VÁRIAS AUTO-ENERGIAS

Exemplo

$H|+\rangle = \hbar\omega_0|+\rangle$

$H|-\rangle = -\hbar\omega_0|-\rangle$

Base: $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ Hamiltoniano: $H = \begin{pmatrix} \hbar\omega_0 & 0 \\ 0 & -\hbar\omega_0 \end{pmatrix}$

Dois operadores Hermitianos: $A = \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{pmatrix}$; $B = \begin{pmatrix} 0 & b^* \\ b & 0 \end{pmatrix}$

$[H, A] = 0; \quad [H, B] \neq 0$ A é conservado, mas B não é.

Estado inicial: $|\psi(0)\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle; \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\cancel{\hbar}\omega_0 t/\cancel{\hbar}}\alpha|+\rangle + \beta e^{i\omega_0 t}|-\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega_0 t}\alpha|+\rangle + \beta e^{i\omega_0 t}|-\rangle$$

$$\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \alpha^* e^{i\omega_0 t} & \beta^* e^{-i\omega_0 t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha e^{-i\omega_0 t} \\ \beta e^{+i\omega_0 t} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \alpha^* e^{i\omega_0 t} & \beta^* e^{-i\omega_0 t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \alpha e^{-i\omega_0 t} \\ a_2 \beta e^{i\omega_0 t} \end{pmatrix} = |\alpha|^2 a_1 + |\beta|^2 a_2$$

$$\langle B\rangle(t) = \langle\psi(t)|B|\psi(t)\rangle = \left(\alpha^* e^{i\omega_0 t} \quad \beta^* e^{-i\omega_0 t}\right)\begin{pmatrix}0 & b^*\\ b & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha e^{-i\omega_0 t}\\ \beta e^{i\omega_0 t}\end{pmatrix}$$

$$= \left(\alpha^* e^{i\omega_0 t} \quad \beta^* e^{-i\omega_0 t}\right)\begin{pmatrix} b^*\beta e^{i\omega_0 t}\\ b\alpha e^{-i\omega_0 t}\end{pmatrix}$$

$$= \left(\alpha^*\beta b^*\right) e^{2i\omega_0 t} + \left(\alpha\beta^* b\right) e^{-2i\omega_0 t}$$

FREQUÊNCIAS DE BOHR:

$$2\omega_0 = \frac{\hbar\omega_0 - (-\hbar\omega_0)}{\hbar} = 2\omega_0 \checkmark$$

$$-2\omega_0 = \frac{-\hbar\omega_0 - (\hbar\omega_0)}{\hbar} = -2\omega_0 \checkmark$$

Princípio de incerteza tempo-energia

$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$, EXISTE TAMBÉM ALGO ANÁLOGO ENTRE

O TEMPO E A ENERGIA: $\Delta t \Delta E \gtrsim \hbar$

i) SUPONHA O SISTEMA NUM ESTADO ESTACIONÁRIO, OU SEJA, NUM AUTO-ESTADO DE $\underline{H}$

→ A ENERGIA É TOTALMENTE DETERMINADA: E_n

$\Rightarrow \Delta E = 0$

→ ESTADO ESTACIONÁRIO → NÃO DEPENDE DO TEMPO

$\Delta t \rightarrow \infty$

$\Rightarrow \quad \Delta E \Delta t \gtrsim \hbar \Rightarrow \Delta t \gtrsim \frac{\hbar}{\Delta E} \rightarrow \infty$

ii) SUPERPOSIÇÃO DE 2 AUTO-ESTADOS DE $\underline{H}$:

$$|\psi(t)\rangle = c_1 e^{-iE_1 t/\hbar} |\varphi_1\rangle + c_2 e^{-iE_2 t/\hbar} |\varphi_2\rangle \quad (t_0 = 0)$$

$$\Delta E \cong |E_2 - E_1|$$

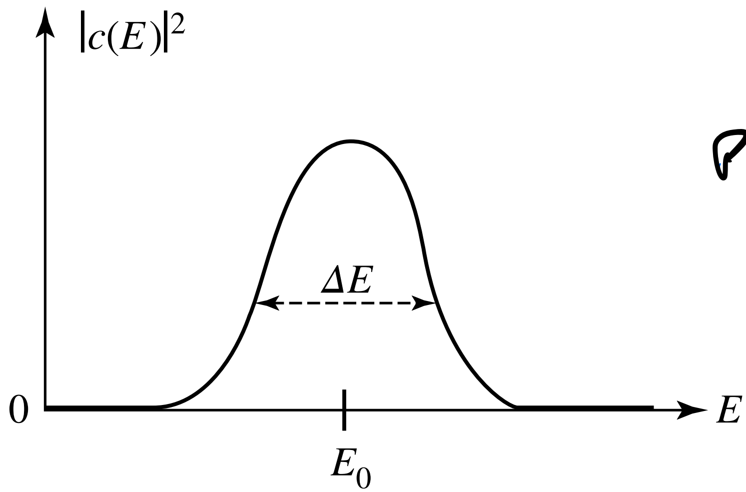
SEJA $\underline{B}$, $[\hat{B}, H] \neq 0 \Rightarrow \langle B\rangle(t)$ OSCILA

COM FREQUÊNCIAS:

$$\Delta t \sim \frac{1}{\nu_{1,2}} = \frac{h}{|E_2 - E_1|}$$

$$\Rightarrow \Delta E \Delta t \approx h \sim \hbar \checkmark$$

iii) $|\psi(t)\rangle = \int dE \; c(E) e^{-iEt/\hbar} |\varphi_E\rangle$



PARA UM $\underline{H}$ COM ESPECTRO CONTÍNUO: SUPONHA $|c(E)|$ COMO NA FIGURA.

SEJA A PROBABILIDADE DE MEDIDA DE UM CERTO AUTO-VALOR b_m DE B (ONDE $[B,H] \neq 0$):

SUPONDO $B|u_m\rangle = b_m|u_m\rangle$ NÃO DEGENERADO

$$P(b_m,t) = |\langle u_m|\psi(t)\rangle|^2$$

$$= \left| \int dE \; c(E) \, e^{-iEt/\hbar} \langle u_m|\varphi_E\rangle \right|^2$$

SUPONDO QUE $\langle u_m|\varphi_E\rangle$ NÃO VARIA MUITO NO INTERVALO $[E_0-\Delta E, E_0+\Delta E]$

$$P(b_m, t) = |\langle u_m | \varphi_{E_0} \rangle|^2 \, \Big| \underbrace{\int dE \; c(E) \, e^{-iEt/\hbar}}_{\substack{\text{TRANSF. FOURIER} \\ \text{DE } c(E) = F(t)}} \Big|^2$$

SE $c(E) \sim \Delta E$

LARGURA DE $F(t) \to \Delta t \sim \dfrac{\hbar}{\Delta E}$

$\Rightarrow \Delta t \, \Delta E \gtrsim \hbar$

SE $[B, H] \neq 0$, PODE-SE PROVAR:

$$\Delta B \, \Delta H \geqslant \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d\langle B \rangle}{dt} \right|$$

PARA QUALQUER ESTADO $|\psi(t)\rangle$

$$\underbrace{\frac{\Delta B}{\left| \frac{d\langle B \rangle}{dt} \right|}}_{\Delta t} \Delta H \geqslant \frac{\hbar}{2}$$

SE $f(t)$

$$df = f' \, dt$$

$$\Delta f \simeq f' \, \Delta t$$

$$\Delta B \simeq \left| \frac{d\langle B \rangle}{dt} \right| \Delta t$$

$$\Rightarrow \quad \Delta t \, \Delta H \geqslant \frac{\hbar}{2}$$

VÁLIDO PARA QUALQUER INSTANTE DO TEMPO