CAP 3. DINÂMICA QUÂNTICA [SAK. 2.1]

- Agora vamos estudar como os sist. quânticos evoluem no tempo.
- O tempo é um parâmetro, e não um observável em MQ não-relativística. Em MQ relativística, tempo e coordenadas passam ambos a ser parâmetros, mas não veremos isto neste curso.

OP. de evolução temporal

- Evolução de kets: $\underbrace{|\alpha, t_0\rangle = |\alpha\rangle}_{\text{inicial}} \xrightarrow{U(t,t_0)} \underbrace{|\alpha, t_0; t\rangle}_{\text{evoluído em } t}$

- Já vimos as propriedades de op. p/ transformações contínuas:
  - $U^{\dagger} U = \mathbb{1}$ (unitariedade, preserva a norma)
  - $U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1) U(t_1, t_0)$ (composição)
  - $\lim_{dt \to 0} U(t_0 + dt, t_0) = \mathbb{1}$

- A evolução infinitesimal que satisfaz as propriedades acima é

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

com $\Omega^{\dagger} = \Omega$ op. Hermitiano.

Agora:

1. Ω tem dim. de frequência (inverso do tempo).
2. Em mec. clássica, o gerador de evolução temporal é a Hamiltoniana.

$$\Rightarrow \boxed{\Omega = \frac{H}{\hbar}} \quad \text{por questão de análise dimensional.}$$

$$\Rightarrow \boxed{U(t_0 + dt, t_0) = \mathbb{1} - \frac{iH\,dt}{\hbar}}$$

- Mais adiante, o teorema de Ehrenfest justifica o fato das CTES c/ dimensão de ação que aparecem em $U(t_0+dt, t_0)$ e $\mathcal{T}(dx')$ serem a mesma $(\hbar)$.

Eq. de Schrödinger

• Compondo 2 U's: $U(t+dt,t_0) = U(t+dt,t)\,U(t,t_0)$

$$= \left(1 - \frac{iH\,dt}{\hbar}\right) U(t,t_0)$$

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

$\Rightarrow$ Na forma de eq. diferencial: $\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = HU(t,t_0)}$ (I)

= eq. diferencial p/ o op. de evolução temporal
(eq. de Schrödinger)

$\Rightarrow$ toda a dinâmica sai desta equação.

• Eq. (I) é equiv. à eq. de Schrödinger p/ kets:

$$\text{(I)}\cdot|\alpha,t_0\rangle \Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{U(t,t_0)|\alpha,t_0\rangle}_{|\alpha,t_0;t\rangle} = H\underbrace{U(t,t_0)|\alpha,t_0\rangle}_{|\alpha,t_0;t\rangle}$$

$\Rightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t_0;t\rangle = H|\alpha,t_0;t\rangle}$ ← eq. Schrödinger (II)

• Se soubermos $U(t,t_0)$, sabemos que $|\alpha,t_0;t\rangle = U(t,t_0)|\alpha,t_0\rangle$, sem precisar resolver a eq. de Schrödinger II. Vamos então obter soluções formais p/ eq. (I) em diversos casos de interesse.

Caso 1: H é indep. de t. Ex: spin precessionando em $\vec{B}$ cte.

Solução de (I): $U(t,t_0) = \exp\left[\frac{-iH\cdot(t-t_0)}{\hbar}\right]$ [fácil de verificar derivando]

Caso 2:

· H depende de t, mas $[H(t), H(t')] = 0 \ \forall \ t, t'$. Exemplo: spin $\frac{1}{2}$ em campo $\vec{B} = B(t)\,\hat{z}$.

Solução de (I): $U(t,t_0) = \exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t} dt'\, H(t')\right]$

Verificando: $(\ ) \equiv \left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H(t')\right)$; $U(t,t_0) = \exp(\ )$.

$$\exp(\ ) = 1 + (\ ) + \frac{1}{2!}(\ )^2 + \frac{1}{3!}(\ )^3 + \dots$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\exp(\ ) = \frac{\partial}{\partial t}(\ ) + \frac{2}{2!}(\ )\frac{\partial}{\partial t}(\ ) + \frac{1}{3!}\cdot 3(\ )^2\cdot\frac{\partial}{\partial t}(\ ) + \dots$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\ ) = \frac{\partial}{\partial t}\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\, H(t')\right) = -\frac{i}{\hbar}H(t)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\exp(\ ) = -\frac{i}{\hbar}H(t) + (\ )\cdot\left(-\frac{i}{\hbar}\right)H(t) + \frac{1}{2!}(\ )^2\left(-\frac{i}{\hbar}H(t)\right) + \dots$$

$$= -\frac{i}{\hbar}H(t)\underbrace{\left[1 + (\ ) + \frac{1}{2!}(\ )^2 + \dots\right]}_{\exp(\ )}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\exp(\ ) = -\frac{i}{\hbar}H(t)\exp(\ ) \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = -\frac{i}{\hbar}H(t)\,U(t,t_0)$$

como queríamos verificar.

Caso 3: $H(t)$ dependente de t e arbitrário (não necessariamente comuta p/ t's diferentes)

Ex: SPIN em campo $\vec{B}(t)$.

$$H(t) = \vec{S}\cdot\vec{B}(t)$$

Solução formal: $$U(t,t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\, H(t_1)H(t_2)\cdots H(t_n)$$

Prova: veremos bem mais adiante.

O caso 1 (H indep. de t) é o mais simples, vamos assumir que este é o caso daqui para a frente.

$$U(t,t_0) = \exp\left[\frac{-iH\cdot(t-t_0)}{\hbar}\right]$$

Evolução de auto-estados de energia

$$H|a_i\rangle = E_i|a_i\rangle$$

Expandindo $U(t,t_0)$ na base $\{|a_i\rangle\}$:

$$\mathbb{1}\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)\mathbb{1} = \sum_i\sum_j |a_j\rangle\underbrace{\langle a_j|\exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)|a_i\rangle}_{\exp\left(-\frac{iE_it}{\hbar}\right)\delta_{ij}}\langle a_i| = \sum_i \exp\left(-\frac{iE_it}{\hbar}\right)|a_i\rangle\langle a_i|$$

• Essa expansão p/ $U(t,t_0)$ nos permite resolver qq. cond. inicial dada na base $\{|a_i\rangle\}$:

$$|\alpha, t_0=0\rangle = \sum_i |a_i\rangle\overbrace{\langle a_i|\alpha\rangle}^{\equiv c_i} = \sum_i c_i|a_i\rangle$$

$$\Rightarrow |\alpha, t_0=0; t\rangle = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)|\alpha, t_0=0\rangle = \sum_i |a_i\rangle\underbrace{\langle a_i|\alpha\rangle\exp\left(-\frac{iE_it}{\hbar}\right)}_{c_i(t)\,=\,c_i(0)\exp\left(-\frac{iE_it}{\hbar}\right)}$$

• Se o est. é inicialmente auto-est. de H: $|\alpha, t_0=0\rangle = |a_i\rangle$

$\Rightarrow |\alpha, t_0=0; t\rangle = |a_i\rangle \exp\left(\frac{-iE_i t}{\hbar}\right)$

$\Rightarrow$ auto-est. de H (ou de A tal que $[A,H]=0$) não mudam c/ t (est. estacionários).

<u>ROTEIRO p/ resolver dinâmica p/ H indep t</u>

① Achar <u>simetrias</u> de H: conj. completo de observáveis A_i tais que $[A_i, H] = [A_i, A_j] = 0$.

② Expando est. inicial $|\alpha, t=0\rangle$ na base de auto-estados comuns a $\{H, A_i\}$.

③ $|\alpha, t_0=0; t\rangle = |K_i\rangle \exp\left(-i\frac{E_{K_i} t}{\hbar}\right)$

índices dos A_i's, H.

<u>Como valores esperados variam c/ t</u>

• Se em $t=0$ temos auto-est. de H: $|a_i, t_0=0; t\rangle = U(t,0)|a_i\rangle$

$\langle B\rangle = \langle a_i|U^\dagger(t,0)\, B\, U(t,0)|a_i\rangle$

$= \langle a_i|\exp\left(\frac{iE_i t}{\hbar}\right) B \exp\left(\frac{-iE_i t}{\hbar}\right)|a_i\rangle = \langle a_i|B|a_i\rangle$

$\Rightarrow$ o valor esperado de qualquer observável <u>não muda</u>. $\Rightarrow$ est. estacionários.

• Est. iniciais que são <u>superposições</u> dos $|a_i\rangle$ <u>NÃO</u> são estacionários:

$|\alpha, t_0=0\rangle = \sum_i c_i |a_i\rangle$

$\Rightarrow \langle B\rangle = \left[\sum_i c_i^* \langle a_i| \exp\left(\frac{iE_i t}{\hbar}\right)\right] B \left[\sum_j c_j \exp\left(\frac{-iE_j t}{\hbar}\right)|a_j\rangle\right]$

$= \sum_{ij} c_i^* c_j \langle a_i|B|a_j\rangle \exp\left[\frac{-i(E_j - E_i)t}{\hbar}\right]$

• termos <u>oscilam</u> com freqs. angulares $\omega_{ji} = \frac{E_j - E_i}{\hbar}$

Exemplo: precessão de spin $\frac{1}{2}$

- spin $\frac{1}{2}$ com momento magnético $\frac{e\hbar}{2m_e c}$ e sob ação de campo $\vec{B}$:

$$H = -\left(\frac{e}{m_e c}\right) \vec{S}\cdot\vec{B} \qquad (e<0 \text{ p/ elétron})$$

- B estático: $\vec{B} = B\hat{z} \Rightarrow H = -\frac{eB}{m_e c} S_z$
- $[S_z, H] = 0 \Rightarrow$ auto-estados de S_z são auto-est. de H.

$$E_\pm = \mp \frac{e\hbar B}{2m_e c} \quad \text{para } |\pm\rangle_z$$

- Defino $\omega \equiv \frac{|e|B}{m_e c} \Rightarrow \begin{cases} E_\pm = \pm\frac{\hbar\omega}{2} \\ \frac{E_+ - E_-}{\hbar} = \omega \\ H = \omega S_z \end{cases}$

- Evolução temporal: $U(t,0) = \exp\left(-\frac{i\omega S_z t}{\hbar}\right)$
- Estado inicial: $|\alpha, t=0\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle$

$$\Rightarrow |\alpha, t_0=0; t\rangle = c_+ \underbrace{\exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right)}_{=\exp\left(-\frac{iE_+ t}{\hbar}\right)} |+\rangle + c_- \underbrace{\exp\left(+\frac{i\omega t}{2}\right)}_{\exp\left(-\frac{iE_- t}{\hbar}\right)} |-\rangle$$

- Se $c_+=1, c_-=0 \Rightarrow$ est. é $|+\rangle$ sempre.
- Se $c_+ = c_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow |\alpha, t_0=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) = |+\rangle_x$.

$$\Rightarrow |\langle \pm_x | \alpha, t\rangle|^2 = \left|\frac{1}{2}\left(\langle +| \pm \langle -|\right)\cdot\left(\exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right)|+\rangle + \exp\left(\frac{+i\omega t}{2}\right)|-\rangle\right)\right|^2$$

$$= \left|\frac{1}{2}\exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right) \pm \frac{1}{2}\exp\left(\frac{i\omega t}{2}\right)\right|^2 = \begin{cases} \cos^2\frac{\omega t}{2} & \text{p/ } |+\rangle_x \\ \sin^2\frac{\omega t}{2} & \text{p/ } \langle -|_x \end{cases}$$

Prob. de medir $|\pm\rangle_x$ em t.

$$\Rightarrow \langle S_x\rangle = \frac{\hbar}{2}\cos^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) + \left(-\frac{\hbar}{2}\right)\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)$$

$$= \frac{\hbar}{2}\cos(\omega t)$$

. É fácil calcular $\langle S_y\rangle = \frac{\hbar}{2}\sin(\omega t)$, $\langle S_z\rangle = 0$

$\Rightarrow$ spin precessiona no plano xy.

Dinâmica: as descrições de Schrödinger e Heisenberg [SAK. 2.2]

- Vimos que observáveis são operadores (fixos), e kets evoluem de acordo com a eq de Schrödinger – esta é a chamada descrição de Schrödinger da dinâmica.

- Há uma descrição alternativa (chamada de Heisenberg) em que o ket fica "parado" e só os observáveis que evoluem no tempo.

- Vimos como kets evoluem: $|\alpha\rangle \to U|\alpha\rangle$
- Como U é unitário, produtos internos se preservam:
$$\langle\beta|\alpha\rangle \to \langle\beta|U^{\dagger}U|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle$$
- Como mudam valores esperados?
$$\langle\beta|A|\alpha\rangle \to (\langle\beta|U^{\dagger})A(U|\alpha\rangle) = \langle\beta|U^{\dagger}AU|\alpha\rangle$$
- Há 2 maneiras de interpretar:
  - Schrödinger: $|\alpha\rangle \to U|\alpha\rangle$, A não muda.
  - Heisenberg: $A \to U^{\dagger}AU$, $|\alpha\rangle$ não muda.

Exemplo: translação infinitesimal $U = \mathcal{T}(d\vec{x}') = \left(1 - \frac{i\vec{p}\cdot d\vec{x}'}{\hbar}\right)$

Schrödinger:
$$\begin{cases} |\alpha\rangle \to \left(1 - \frac{i\vec{p}\cdot d\vec{x}'}{\hbar}\right)|\alpha\rangle \\ \hat{x} \to \hat{x} \end{cases}$$

Heisenberg:
$$|\alpha\rangle \to |\alpha\rangle$$
$$\hat{x} \to \overbrace{\left(1 + \frac{i\vec{p}\cdot d\vec{x}'}{\hbar}\right)}^{U^{\dagger}}\hat{x}\overbrace{\left(1 - \frac{i\vec{p}\cdot d\vec{x}'}{\hbar}\right)}^{U}$$
$$= \hat{x} + \frac{i}{\hbar}[\vec{p}\cdot d\vec{x}', \hat{x}] = x + d\vec{x}'$$

De qualquer forma $\langle x\rangle \to \langle x\rangle + \langle d\vec{x}'\rangle$

Kets e observáveis nas 2 descrições

• Por simplicidade, escolhemos $t_0=0$: $U(t, t_0=0) = U(t) = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)$

(H indep. t)

• Definimos o observável na descrição de Heisenberg:

$$A^{(H)}(t) \equiv U^\dagger(t)\, A^{(S)}\, U(t) \qquad \text{com} \qquad A^{(H)}(t=0) = A^{(S)}.$$

• Kets também coincidem em $t=0$; depois $|\alpha\rangle_H$ fica fixo $= |\alpha, t=0\rangle_S$.

$$|\alpha\rangle_H = |\alpha, t_0=0\rangle_S \quad \text{mas}$$

$$|\alpha, t\rangle_S = U(t)\,|\alpha, t=0\rangle_S$$

• Valores esperados são os mesmos nas 2 descrições:

$$_S\langle\alpha, t|\, A^{(S)}\, |\alpha, t\rangle_S = {}_S\langle\alpha, t=0|\, \underbrace{U^\dagger A\, U}\, |\alpha, t=0\rangle_S$$

$$= {}_H\langle\alpha|\quad A^{(H)} \quad |\alpha\rangle_H$$

Eq. de movimento na descr. de Heisenberg

$$A^{H}(t) = U^\dagger(t)\, A^{(S)}\, U(t) \Rightarrow \frac{dA^{(H)}}{dt} = \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} A^{(S)} U + U^\dagger A^{(S)} \frac{\partial U}{\partial t}$$

Uso: $\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} H U$ e $\frac{\partial U^\dagger}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger H$ } é a eq. de Schrödinger p/ U

$$\Rightarrow = -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger H \overset{UU^\dagger = \mathbb{1}}{\vee} A^{(S)} U + \frac{1}{i\hbar} U^\dagger A^{(S)} \overset{UU^\dagger = \mathbb{1}}{\vee} H U$$

$$\Rightarrow = -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger H U U^\dagger A^{(S)} U + \frac{1}{i\hbar} U^\dagger A^{(S)} U U^\dagger H U$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left[A^{(H)}, \underbrace{U^\dagger H U}_{H^{(H)}}\right]$$

• Repare que se H é indep. de t, $U = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)$ e $H^{(H)} = U^\dagger H^{(S)} U = H^{(S)}$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{dA^{(H)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[A^{(H)}, H\right]} \quad \leftarrow \text{eq. de movimento de Heisenberg.}$$

• Reparem no análogo clássico: para função $A(q,p)$ sem dependência temporal explícita, vale

$$\frac{dA}{dt} = [A, H]_{(CLASS)} \quad \text{onde } [\,,\,]_{(CLASS)} = \text{parênteses de Poisson.}$$

Part. livre e teorema de Ehrenfest

• Para resolver a dinâmica precisamos de $\hat{H}$. Em caso de análogo clássico, troque $x \to \hat{x}$, $p \to \hat{p}$, com cuidado com ambiguidades devido à não-comutação. Por exemplo: $xp \to \hat{x}\hat{p}$, $\hat{p}\hat{x}$ ou $\frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})$?

• Para a discussão abaixo precisaremos das fórmulas:

$$[x_i, F(\vec{p})] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial p_i}$$

$$[p_i, G(\vec{x})] = -i\hbar \frac{\partial G}{\partial x_i}$$

Provando: uso repetidamente $[A,BC] = [A,B]C + B[A,C]$

$[x,p] = i\hbar$

$[x,p^2] = [x,p]p + p[x,p] = 2i\hbar p$

$[x,p^3] = [x,p^2]p + p^2[x,p] = 3i\hbar p^2$

$\Rightarrow [x,p^n] = i\hbar n p^{n-1}$ (I)

$$\left.\begin{aligned} f(p) &= \sum_n c_n p^n \\ \frac{\partial f}{\partial p} &= \sum_n c_n n p^{n-1} \end{aligned}\right\} \Rightarrow [x, f(p)] = [x, \sum_n c_n p^n] = \sum_n c_n [x,p^n] \overset{(I)}{=} \sum_n c_n i\hbar n p^{n-1} = i\hbar \frac{\partial f}{\partial p}$$

o 2º resultado é provado de forma parecida.

Part. livre na descrição de Heisenberg

- $H = \frac{p^2}{2m} = \frac{(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)}{2m}$ p_i, x_i = operadores na descrição de Heisenberg

- P_i comuta com qq. funç. dos p_j's: $\Rightarrow$

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[p_i, H] = 0 \quad \Rightarrow \quad p_i(t) = p_i(0)$$

- isso é exemplo de fato + geral: se $A^{(H)}$ comuta com H, $A^{(H)}$ é cte do movimento.

- Agora x_i:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[x_i, H] = \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{2m} i\hbar \underbrace{\frac{\partial}{\partial p_i}\left(\sum_{j=1}^{3} p_j^2\right)}_{2p_i}$$ [Usei $[x_i, F(\vec{p})] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial p_i}$

$$= \frac{p_i}{m} = \frac{p_i(0)}{m}$$

$$\Rightarrow \boxed{x_i(t) = x_i(0) + \frac{p_i(0)}{m} t}$$ ← lembra a eq. clássica de movimento.

- Note que $[x_i(0), x_j(0)] = 0$ mas isso não é mais verdade p/ $t>0$:

$$[x_i(t), x_i(0)] = \left[\frac{p_i(0)t}{m}, x_i(0)\right] = -\frac{i\hbar t}{m}$$

- Aplico a rel. de incerteza p/ $x_i(t), x_i(0)$:

$$\boxed{\langle(\Delta x_i(t))^2\rangle\langle(\Delta x_i(0))^2\rangle \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}}$$ ← ~~...~~ Mesmo que a part. esteja bem-localizada em $t=0$, sofrerá dispersão p/ $t>0$.

- Adicionando $V(x)$ à part. livre:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{x})$$

← $V(\vec{x})$ é função dos operadores x, y, z.

- Uso $[p_i, G(\vec{x})] = -i\hbar \frac{\partial G}{\partial x_i}$ $\Rightarrow$ $\boxed{\frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[p_i, V(\vec{x})] = -\frac{\partial}{\partial x_i} V(\vec{x})}$ (I)

- Eq. p/ $x_i(t)$: $\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[x_i, H] = \frac{p_i}{m}$ [x_i comuta com novo termo $V(\vec{x})$]

$$\frac{d^2x_i}{dt^2} = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{dx_i}{dt}, H\right] = \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{p_i}{m}, H\right] = \frac{1}{m}\frac{dp_i}{dt}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d^2x_i}{dt} = \frac{1}{m}\frac{dp_i}{dt}} \quad \text{(II)}$$

- Combina (I) e (II): $\boxed{m\frac{d^2\vec{x}}{dt^2} = -\vec{\nabla}V(\vec{x})}$ (III) ← eq. p/ operadores em MQ da 2ª Lei de Newton.

- Tiro valores esperados: $\boxed{m\frac{d^2\langle\vec{x}\rangle}{dt^2} = \frac{d\langle\vec{p}\rangle}{dt} = -\langle\vec{\nabla}V(\vec{x})\rangle}$ (IV)

(IV) é o <u>teorema de Ehrenfest</u>, e é verdade p/ descrição de Heisenberg <u>ou</u> Schrödinger (valores esperados são os mesmos).

- Os valores esperados se comportam como partícula clássica.

Vetores-base

- Como observáveis são funções de t na descrição de Heisenberg, seus autovetores (uma <u>base</u>) também serão. Vejamos isso com mais cuidado.

$$A^{(H)}(t) = U^\dagger A(0) U \qquad A^{(H)}(t)$$

autovalores de observáveis equivalentes não mudam

eq. de autovalores: $\underbrace{U^\dagger A(0) U}_{A^{(H)}(t)} |a'(t)\rangle = a' |a'(t)\rangle$

avaliada em $t=0$: $A(0) \underset{UU^\dagger = \mathbb{1}}{\wedge} |a'(0)\rangle = a' |a'(0)\rangle$

$$\Rightarrow \underbrace{U^\dagger A(0) U}\, U^\dagger |a'(0)\rangle = U^\dagger a' |a'(0)\rangle$$

$$A^{(H)} \left(U^\dagger |a'(0)\rangle\right) = a' \left(U^\dagger |a'(0)\rangle\right)$$

- Vemos que a base de auto-estados de $A^{(H)}$ evolui assim:

$$\boxed{|a'(t)\rangle_H = U^\dagger |a'(0)\rangle}$$

← o $U^{\dagger}$ mostra que autovetores evoluem ao contrário dos vetores na descrição de Schrödinger

- A evolução dos auto-vetores satisfaz à eq. de Schrödinger com sinal "errado": $\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |a'(t)\rangle_H = -H |a'(t)\rangle_H}$

- A representação espectral é consistente:

$$A^{(H)}(t) = U^\dagger A^{(S)} U = \sum_i U^\dagger |a_i\rangle a_i \langle a_i| U = \sum_i |a_i(t)\rangle a_i \langle a_i(t)|$$

- Os coeficientes de $|\alpha\rangle$ na base são os mesmos nas 2 descrições:

$$c_i(t) = \langle a_i| \left(U |\alpha, t=0\rangle\right) \qquad \text{Schrödinger: } |\alpha\rangle = |\alpha, t\rangle,\ |a_i\rangle \text{ fixo}$$

$$= \left(\langle a_i| U\right) |\alpha, t=0\rangle \qquad \text{Heisenberg: } |\alpha\rangle \text{ fixo};\ |a_i\rangle = |a_i(t)\rangle$$

Amplitudes de transição

• Em $t=0$ temos autoestado de A com autovalor a_i. No tempo t, qual é a [amplitude de probabilidade] de encontrarmos o sistema num auto-estado de B com autovalor b_j? = amplitude de transição

Schrödinger: $\langle b_j | (U | a_i \rangle)$

Heisenberg: $(\langle b_j | U) | a_i \rangle$.

• São a mesma amplitude: $\langle b_j | U(t,0) | a_i \rangle$

• Chamamos de amplitude de transição do est. $|a_i\rangle$ para o $|b_j\rangle$

Resumo:

	Schrödinger	Heisenberg
ESTADO:	MUDA $\lvert\alpha,t\rangle = U(t,t_0)\lvert\alpha,t_0\rangle$ $i\hbar \frac{\partial \lvert\alpha,t\rangle}{\partial t} = H\lvert\alpha,t\rangle$	ESTACIONÁRIO
Observável:	ESTACIONÁRIO	MUDA $A^{(H)}(t) = U^{\dagger} A^{(S)} U$ $\frac{dA^{(H)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A^{(H)}, H]$
Vetor-base	ESTACIONÁRIO	MUDA NA "DIREÇÃO OPOSTA" $\lvert a', t\rangle_H = U^{\dagger} \lvert a'\rangle$ $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \lvert a', t\rangle_H = -H \lvert a', t\rangle$

Princípio da Incerteza de Energia/tempo [GRIFFITHS 3.5.3]

$$\boxed{\Delta t\, \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}}$$

Mas tempo não é um observável, então Δt aqui não tem a interpretação de variância (dispersão) estatística.

- Formalmente, parece com a relação de incerteza p/ observáveis que não comutam, mas é diferente. Vamos derivá-la, dando a interpretação correta p/ Δt, ΔE.

- Vimos que se observável Q não depende explicitamente de t, temos

$$\frac{d\langle \hat{Q}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{Q}, H]\rangle$$

- Vamos usar a relação de incerteza: $\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2$

com $A = Q$, $B = H$ $\Rightarrow$ $\langle(\Delta Q)^2\rangle\langle(\Delta H)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[Q,H]\rangle|^2$

$$\Rightarrow \langle(\Delta Q)^2\rangle\langle(\Delta H)^2\rangle \geq \frac{1}{4}\left|i\hbar\frac{d\langle Q\rangle}{dt}\right|^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\left|\frac{d\langle Q\rangle}{dt}\right|^2$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle(\Delta Q)^2\rangle\langle(\Delta H)^2\rangle \geq \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\left|\frac{d\langle Q\rangle}{dt}\right|}$$

- Na ineq. acima $\langle(\Delta H)^2\rangle$ é a variância da energia, e definimos $(\Delta t)^2 = \dfrac{\langle(\Delta Q)^2\rangle}{\left|\frac{d\langle Q\rangle}{dt}\right|^2}$. De acordo com essa definição,

$\sqrt{\langle(\Delta Q)^2\rangle} = \left|\frac{d\langle Q\rangle}{dt}\right|\Delta t$, ou seja, Δt é o tempo para Q variar de um desvio-padrão $\Rightarrow$ depende do observável Q em questão, e da Hamiltoniana (que governa a dinâmica).

· Com esta definição de Δt, temos

$$\boxed{\underbrace{\sqrt{\langle(\Delta H)^2\rangle}}_{\Delta E} \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}}$$

← Princípio de incerteza energia/tempo.

Exemplos de aplicação:

I) Dinâmica de superposição de 2 auto-estados de H.

$$|\alpha,t\rangle = a|E_1\rangle e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} + b|E_2\rangle e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}}$$

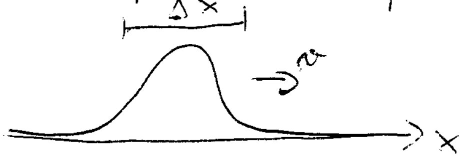
Prob. de medir em $|\beta\rangle$ $\quad |\langle\beta|\alpha,t\rangle|^2 = \left| a\langle\beta|E_1\rangle e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} + b\langle\beta|E_2\rangle e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}} \right|$

oscila com período $\tau = \frac{2\pi\hbar}{(E_2-E_1)}$

· Grosso modo, $\Delta E = E_2 - E_1$, $\Delta t = \tau$

$$\Rightarrow \Delta E \Delta t = 2\pi\hbar \quad \left(\text{compatível com } \Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}\right)$$

II) Δt p/ 1 pacote de onda passar



$$\Delta t = \frac{\Delta x}{v} = \frac{m\Delta x}{p}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \Delta E = \frac{p\Delta p}{m} \quad \text{[derivando]}$$

$$\Rightarrow \Delta E \Delta t = \frac{p\Delta p}{m}\frac{m\Delta x}{p} = \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Oscilador Harmônico Quântico

- Tem muitas aplicações, e técnicas usadas na solução são úteis em muitos outros problemas.
- Usaremos operadores p/ estudar o problema, como fez Dirac.

Auto-estados e auto-valores da energia

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$ $\omega =$ freq. angular do oscilador (clássico)

- Definimos 2 op. não-Hermitianos: $a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{ip}{m\omega}\right)$ ← op de destruição/aniquilação

$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{ip}{m\omega}\right)$ ← op. de criação

$$\Rightarrow [a,a^\dagger] = \left(\frac{1}{2\hbar}\right)\left(-i[x,p] + i[p,x]\right) = 1.$$

- Definimos o op número $\boxed{N = a^\dagger a}$ (Hermitiano)

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

- Podemos então escrever a Hamiltoniana como fç. dos op. a e $a^\dagger$.

$$\boxed{H = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right)} \qquad \text{(I)}$$

- Repare que $[H,N]=0$ ⇒ podem ser diagonalizados simultaneamente.
- $|n\rangle$ são autovalores de N (e H): $N|n\rangle = n|n\rangle$
- (I) significa que $H|n\rangle = \underbrace{\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega}_{E_n}|n\rangle \Rightarrow \boxed{E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega}$
- Por quê os nomes criação/aniquilação?

$$[N,a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger a a \underbrace{-}_{-a^\dagger a a + a^\dagger a a} a a^\dagger a = a^\dagger \underbrace{[a,a]}_{0} + \underbrace{[a^\dagger,a]}_{-1} a = -a \Rightarrow \boxed{[N,a] = -a}$$

De forma similar: $\underline{[N,a^\dagger] = a^\dagger}$

$$\Rightarrow \begin{cases} N a^\dagger|n\rangle = (\underbrace{[N,a^\dagger]}_{a^\dagger} + a^\dagger N)|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle \\ N a|n\rangle = (\underbrace{[N,a]}_{-a} + aN)|n\rangle = (n-1)a|n\rangle \end{cases}$$

$\Rightarrow$ $(a^\dagger|n\rangle)$ é auto-est. de N com autovalor $(n+1)$ $\leftarrow a^\dagger$ é op. de criação (de geração) de E.

$a|n\rangle$ " N " $(n-1)$ $\leftarrow a$ é op. de aniquilação.

Ou seja, $a|n\rangle$ e $|n-1\rangle$ são proporcionais: $a|n\rangle = c\cdot|n-1\rangle$

c a ser determinado.

$$\langle n|\underbrace{a^\dagger a}_{N}|n\rangle = |c|^2 = n\langle n|n\rangle = n$$

$\Rightarrow n = |c|^2$. Convenção: $c = \sqrt{n}$ $\Rightarrow$ $\underline{a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle}$

É fácil mostrar que $\underline{a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle}$

O que acontece se atuo em $|n\rangle$ repetidamente com a?

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$
$$a^2|n\rangle = a(\sqrt{n}|n-1\rangle) = \sqrt{n}\sqrt{n-1}\,|n-2\rangle$$
$$\vdots$$

- $n \geq 0$ pois $n = \langle n|N|n\rangle = (\langle n|a^\dagger)(a|n\rangle) \geq 0$
- Se n não for inteiro ≥ 0, a seq. continua indefinidamente, levando a auto-est. com $n<0$ (proibidos)

$\Rightarrow$ $\underline{n \text{ é inteiro e } n \geq 0}$.

- $n=0 \Rightarrow$ est. fundamental com $E_0 = (\underset{\uparrow_{n=0}}{n}+\frac{1}{2})\hbar\omega = \frac{\hbar\omega}{2}$

- Uso op. a^+ p/ obter estados excitados: $a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$

$|1\rangle = a^+|0\rangle$

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

$\vdots$

$$\boxed{|n\rangle = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle}$$ ← auto-estados de energia, com autovalores $E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$

Elementos de matriz

- de a, a^+ saem de: $\begin{cases} a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \\ a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \end{cases}$ e $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$

$$\boxed{\begin{aligned} \langle n'|a|n\rangle &= \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} \\ \langle n'|a^+|n\rangle &= \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1} \end{aligned}}$$

- Resolvo x, p em função de a, a^+ para obter elementos de matriz de x, p:

$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^+)$ $\qquad p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-a + a^+)$

$\Rightarrow \langle n'|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}\right)$

$\langle n'|p|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(-\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}\right)$

- x e p não são diagonais na base $\{|n\rangle\}$ – x, p, a, a^+ não comutam com N (ou H)

Autoestados de energia na base de posição

- O est. fundamental $|0\rangle$ satisfaz $a|0\rangle = 0$
- Na representação x: $\langle x'|a|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\langle x'|\left(x + \frac{ip}{m\omega}\right)|0\rangle = 0$

Lembrando: $\langle x'|p|\alpha\rangle = -i\hbar \frac{d}{dx'}\langle x'|\alpha\rangle$

$$\Rightarrow \langle x'|a|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\underbrace{\langle x'|x|0\rangle}_{x'\langle x'|0\rangle} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\frac{i}{m\omega}\underbrace{\langle x'|p|0\rangle}_{-i\hbar\frac{d}{dx'}\langle x'|\alpha\rangle} = 0$$

$\Rightarrow \langle x'|0\rangle$ = est. fundamental satisfaz

$$\left(x' + x_0^2\frac{d}{dx'}\right)\langle x'|0\rangle = 0 \qquad \text{com } x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$ é comprimento característico do oscilador.

- Solução normalizada: $\boxed{\langle x'|0\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right]}$ ← f. de onda do est. fundamental

- As funções de onda de est. excitados são obtidas através com $(a^\dagger)^n$ em $\langle x'|0\rangle$:

$\langle x'|1\rangle = \langle x'|a^\dagger|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\,x_0}\left(x' - x_0^2\frac{d}{dx'}\langle x'|0\rangle\right)$ etc.

⋮

A fórmula geral: $\langle x'|n\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}}\frac{1}{\left(x_0^{n+\frac{1}{2}}\right)}\left(x' - x_0^2\frac{d}{dx'}\right)^n\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right]$

Variâncias de x, p

- Vamos calcular $\langle x^2\rangle, \langle p^2\rangle$ para $|0\rangle$

$$x^2 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)\left(a^2 + a^{+2} + a^+a + aa^+\right) \Rightarrow \langle x^2\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\underbrace{\langle 0|aa^+|0\rangle}_{\langle 1|1\rangle = 1} = \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{x_0^2}{2}$$

- Da mesma forma $\langle p^2\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}$

$$\langle T\rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m}\right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\langle H\rangle}{2} \quad , \quad \langle V\rangle = \frac{m\omega^2}{2}\langle x^2\rangle = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\langle H\rangle}{2} \quad \text{(VIRIAL)}$$

- Dos resultados p/ $\langle n'|x|n\rangle$, $\langle n'|p|n\rangle$ $\Rightarrow \langle x\rangle = \langle p\rangle = 0$

$$\Rightarrow \langle(\Delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad , \quad \langle(\Delta p)^2\rangle = \langle p^2\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}$$

$$\Rightarrow \langle(\Delta x)^2\rangle\langle \Delta p^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4}$$ ← $\langle x'|0\rangle$ é est. de incerteza mínima.

- Podemos calcular facilmente $\langle(\Delta x)^2\rangle_n \langle(\Delta p)^2\rangle_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar^2$ ← p/ estado $\langle x'|n\rangle$