

- Agora vamos estudar como os int. 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: $\underbrace{|x, t_0\rangle}_{\text{inicial}} = |x\rangle \xrightarrow{U(t, t_0)} \underbrace{|x, t_0; t\rangle}_{\text{evoluído em } t}$

- 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)

- $\lim_{dt \rightarrow 0} U(t_0 + dt, t_0) = \mathbb{1}$

- A evolução infinitesimal que satisfaz as propriedades acima é $U(t_0 + dt, t_0) = \mathbb{1} - i\mathcal{H} dt$

com $\mathcal{H}^\dagger = \mathcal{H}$ op. Hermitianas.

Agora:

- ① $\mathcal{H}$ tem dim. de frequência (inverso do tempo).

- ② Em mec. clássica, o gerador de evolução temporal é a Hamiltoniana.

$$\Rightarrow \left[\mathcal{H} = \frac{H}{\hbar} \right] \text{ por questão de unidade dimensional.}$$

$$\Rightarrow \left[U(t_0 + dt, t_0) = \mathbb{1} - \frac{iH dt}{\hbar} \right]$$

- Mais adiante, o teorema de Ehrenfest justifica o fato dos CTEs <1 dimensão de ação que aparecem em $U(t_0 + dt, t_0)$ e $\mathcal{L}(dx)$ serem $\frac{a}{\hbar}$ ($\frac{a}{\hbar}$).

Eq. de Schrödinger

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

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

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

$$\Rightarrow \text{Na forma de eq. diferencial: } \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = \cancel{U(t, t_0)} H U(t, t_0) \right] \quad \textcircled{I}$$

= eq. diferencial p/ o op. de evolução temporal

$\Rightarrow$ toda a dinâmica sai desta equação. (eq. de Schrödinger)

• Eq. $\textcircled{I}$ é equiv. à eq. de Schrödinger p/ Fets:

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

$$\Rightarrow \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle = H |\alpha, t_0; t\rangle \right] \leftarrow \text{eq. Schrödinger } \textcircled{II}$$

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

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

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

Caso 2:

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

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

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

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

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

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

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

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

$\exp()$

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

como queríamos verificar.

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

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

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

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

Prova: vemos 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.

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

Evolução de auto-estados de energia

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

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

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

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

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

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

• 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).

ROTEIRO p/ resolver dinâmica p/ H indep t

① Adiar simetrias de H : conj. completo de observáveis A_i tais que
 $[A_i, H] = [A_i, A_j] = 0$.

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

③ ~~Adiar~~ $|\alpha, t_0=0; t\rangle = |K_i\rangle \exp\left(\frac{-iE_{K_i} t}{\hbar}\right)$
 $\uparrow$ índices dos A_i 's, H .

Como valores esperados variam c/ t

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

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

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

$\Rightarrow$ o valor esperado de qualquer observável não muda $\Rightarrow$ est. estacionários.

• ~~Supondo~~ Est. iniciais que são superposições dos $|a_i\rangle$ NÃO são estacionários:

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

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle B \rangle &= \left[\sum_i c_i^* \langle a_i | \exp\left(\frac{iE_i t}{\hbar}\right) \right] B \left[\sum_j c_j \exp\left(\frac{-iE_j t}{\hbar}\right) | a_j \rangle \right] \\ &= \sum_{i,j} c_i^* c_j \langle a_i | B | a_j \rangle \exp\left[\frac{-i(E_j - E_i) t}{\hbar}\right] \end{aligned}$$

• termos oscilam com freq. 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 $\vec{B}$:

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

- Rotacional: $\vec{B} = B \hat{z} \Rightarrow H = - \frac{eB}{m_e c} S_z$

- $[S_z, H] = 0 \Rightarrow$ auto-estados de S_z sã auto-est. de H .

$$E_{\pm} = \mp \frac{e\hbar B}{2m_e c} \quad \text{para } |\pm\rangle \text{ de } \hat{S}_z$$

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

- Evolução temporal: $U(t,0) = \exp\left(-\frac{i\omega S_z t}{\hbar}\right)$

- Estados iniciais: $|\alpha, t=0\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle$

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

- Se $c_+ = 1, c_- = 0 \Rightarrow$ est. $|+\rangle$ sempre.

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

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

$$= \left| \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right) \pm \frac{1}{2} \exp\left(+\frac{i\omega t}{2}\right) \right|^2 = \begin{cases} \cos^2 \frac{\omega t}{2} & \text{p/ } |+\rangle_x \\ \sin^2 \frac{\omega t}{2} & \text{p/ } |-\rangle_x \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{prob. de medir} \\ | \pm \rangle_x \text{ em } t. \end{matrix}$$

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

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

$\Rightarrow$ spin precession no plano xy .

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

- Vimos que observáveis sã operadores ($\hat{O}$), 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 sã os observáveis que evoluem no tempo.
- Vimos como kets evoluem: $|\alpha\rangle \rightarrow U|\alpha\rangle$
- Como U é unitário, produtos internos se preservam:

$$\langle\beta|\alpha\rangle \rightarrow \langle\beta|U^\dagger U|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle$$
- Como mudam valores esperados?

$$\langle\beta|A|\alpha\rangle \rightarrow \langle\beta|U^\dagger A(U|\alpha\rangle) = \langle\beta|U^\dagger A U|\alpha\rangle$$
- Há 2 maneiras de interpretar:
 - Schrödinger: $|\alpha\rangle \rightarrow U|\alpha\rangle$, A não muda.
 - Heisenberg: $A \rightarrow U^\dagger A U$, $|\alpha\rangle$ não muda.

Exemplo: translação infinitesimal $U = \mathcal{T}(d\vec{x}) = \left(1 - i\frac{\vec{p} \cdot d\vec{x}}{\hbar}\right)$

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

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

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

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

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

Part. livre e teorema de Ehrenfest

• Para resolver a dinâmica precisamos de $\hat{H}$. Em caso de análogo clássico, troque $x \rightarrow \hat{x}$, $p \rightarrow \hat{p}$, com cuidado com ambigüidades devido

à não-comutação. Por exemplo: $xp \rightarrow \hat{x}\hat{p}$, $\hat{p}\hat{x}$ ou $\frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})$?

• Para a discussão abaixo precisamos

das fórmulas: $[x_i, F(\hat{p})] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial p_i}$

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

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

$$[x, p] = i\hbar$$

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

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

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

$$f(p) = \sum_n c_n p^n \quad \Rightarrow [x, f(p)] = [x, \sum_n c_n p^n] = \sum_n c_n [x, p^n] \stackrel{(\pm)}{\downarrow} = \sum_n c_n i\hbar n p^{n-1}$$

$$\frac{df}{dp} = \sum_n c_n n p^{n-1} \quad = i\hbar \frac{df}{dp}$$

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. função 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 :

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [x_i, H] = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{2m} i\hbar \underbrace{\frac{\partial}{\partial p_i} \left(\sum_{j=1}^3 p_j^2 \right)}_{2p_i} \left[\text{Use } [x_i, F(\vec{p})] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial p_i} \right] \\ &= \frac{p_i}{m} = \frac{p_i(0)}{m} \end{aligned}$$

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

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/ $x_i(t), x_i(0)$:

$$\boxed{\langle (\Delta x_i(t))^2 \rangle \langle (\Delta x_i(0))^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}}$$

$\leftarrow$ Mesmo que a part. esteja bem-localizada em $t=0$, depois dispersa p/ $t > 0$.

- Adicionando $V(x)$ à part. livre:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \underbrace{V(\vec{x})}_{\substack{\uparrow \\ V(\vec{x}) \text{ é func dos qntos } x, y, z.}}$$

- Usando $[p_i, G(\vec{x})] = -i\hbar \frac{\partial G}{\partial x_i} \Rightarrow \left[\frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [p_i, V(\vec{x})] = -\frac{\partial}{\partial x_i} V(\vec{x}) \right] \quad \textcircled{I}$

- Ex. p/ $x_i(t)$: $\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [x_i, H] = \frac{p_i}{m} \left[\begin{array}{l} x_i \text{ comuta com todo termo} \\ V(\vec{x}) \end{array} \right]$

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

$$\Rightarrow \left[\frac{d^2 x_i}{dt^2} = \frac{1}{m} \frac{dp_i}{dt} \right] \quad \textcircled{II}$$

- Combinando $\textcircled{I}$ e $\textcircled{II}$: $\left[m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = -\vec{\nabla} V(\vec{x}) \right] \quad \textcircled{III} \quad \leftarrow \text{ex. p/ operadores em MQ da 2ª Lei de Newton.}$

- Para valores esperados: $\left[m \frac{d^2 \langle \vec{x} \rangle}{dt^2} = \frac{d \langle \vec{p} \rangle}{dt} = -\langle \vec{\nabla} V(\vec{x}) \rangle \right] \quad \textcircled{IV}$

$\textcircled{IV}$ é o teorema de Ehrenfest, e é verdade p/ deriv. de Heisenberg de slurdingen

- Os valores esperados se comportam como partícula clássica.

(valores esperados nã os normais).

Vetores-base

- Uma observável A função de t na descrição de Heisenberg, seus autovalores (uma base) também m ES. Vejamos isso com mais cuidado.

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

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

avaliada em $t=0$: $A^{(H)}(0) |a'(0)\rangle = a' |a'(0)\rangle$
 $\uparrow$
 $U U^\dagger = 1$

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

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

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

$$|a'(t)\rangle_H = U^\dagger |a'(0)\rangle \quad \leftarrow \text{O } U^\dagger \text{ mostra que autovalores evoluem ao contrário dos vetores na descrição de Schrödinger}$$

- A evolução dos auto-estados satisfaz

eq. de Schrödinger com sinal revirado: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |a'(t)\rangle_H = -H |a'(t)\rangle_H$

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

- A representação espectral é constante:

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

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

$$c_i(t) = \langle a_i | (U |a, t=0\rangle) \quad \text{Schrödinger: } |a\rangle = |a, t\rangle, |a_i\rangle \text{ fixo}$$

$$= (\langle a_i | U) |a, t=0\rangle \quad \text{Heisenberg: } |a\rangle \text{ fixo; } |a_i\rangle = |a_i(t)\rangle$$

Amplitudes de transiç

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

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 transiç ~~o~~ de est. $|a_i\rangle$ para o $|b_j\rangle$.

Resumo:

	Schrödinger	Heisenberg
ESTADO:	MUDA $ a, t\rangle = U(t, t_0) a, t_0\rangle$ $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a, t\rangle = H a, t\rangle$	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 OPÓSTA" $ a, t\rangle_H = U^\dagger a\rangle$ $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a, t\rangle_H = -H a, t\rangle$

Princípio da Incerteza de Energia/Tempo

[Griffiths 3.5.3]

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

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

- Formalmente, parece com ~~relação~~ a relação de incerteza p/ observáveis que não comutam, mas é diferente. Vamos derivá-la, dando a interpretação contra p/ $\Delta t, \Delta E$.

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

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

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

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

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

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

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

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

com esta definição de Δt , temos

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

← Princípio da incerteza
energia/tempo.

Exemplos de aplicação:

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

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

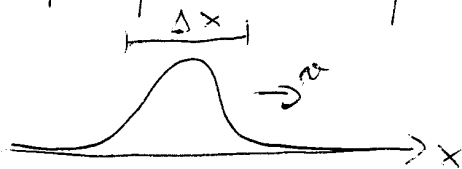
Prob. de medir em $|\beta\rangle$: $|\langle\beta|\alpha, t\rangle|^2 = |a\langle\beta|E_1\rangle e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + b\langle\beta|E_2\rangle e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}}|^2$

existe um período $\tau = \frac{2\pi\hbar}{E_2 - E_1}$

• Como modo, $\Delta E = E_2 - E_1$, $\Delta t = \tau$

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

II) Δt pl 1 pacote de onda paravel



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

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

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

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

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

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

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

- Definimos o op. número $N = a^\dagger a$ (Hermitiano)

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

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

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

- Reparem que $[H, N] = 0 \Rightarrow$ podem ser diagonalizados simultaneamente.

- $|n\rangle$ são autovalores de N (e H): $N|n\rangle = n|n\rangle$

- $\textcircled{I}$ significa que $H|n\rangle = \underbrace{\left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega}_{E_n} |n\rangle \Rightarrow E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$

- Por que os nomes criação/aniquilação?

$$[Na] = [a^\dagger a, a] = \underbrace{a^\dagger a a - a a^\dagger a}_{-a^\dagger a a + a^\dagger a a} = \underbrace{a^\dagger [a, a]}_0 + \underbrace{[a^\dagger, a] a}_{-1} = -a$$

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

$$\Rightarrow (Na^\dagger |n\rangle = ([N, a^\dagger] + a^\dagger N) |n\rangle = (n+1) a^\dagger |n\rangle$$

$$(Na |n\rangle = ([N, a] + a N) |n\rangle = (n-1) a |n\rangle$$

$$\Rightarrow \begin{array}{llll} (a^\dagger |n\rangle) & \text{é auto-est. de } N & \text{com autovalor } (n+1) & \leftarrow \text{op. de criação (de quânton) tw. de } \hbar \\ |a |n\rangle & & N & \text{com autovalor } (n-1) \leftarrow \text{op. de aniquilação.} \end{array}$$

Os v.g.s., $a |n\rangle$ e $|n-1\rangle$ são proporcionais: $a |n\rangle = c |n-1\rangle$
 $\hookrightarrow c$ a ser determinada.

$$\langle n | a^\dagger a |n\rangle = |c|^2 = n \langle n | n \rangle = n$$

$$\Rightarrow n = |c|^2 \quad \text{convenção: } c = \sqrt{n} \Rightarrow |a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

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

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

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

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

$\vdots$

- ~~Se~~ $n \geq 0$ pois $n = \langle n | N | n \rangle = \langle n | a^\dagger a | n \rangle \geq 0$

- Se $n \leq 0$ for inteiro ≥ 0 , a seq. continua indefinidamente, levando a anti-est. com $n < 0$ (proibido)

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

• $n=0 \Rightarrow$ et. fundamental ou $E_0 = \underbrace{\left(n + \frac{1}{2}\right)}_{n=0} \hbar \omega = \frac{\hbar \omega}{2}$

• Uma op. $a^\dagger$ p/ obter estados excitados: $a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$

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

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

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle$$

$\leftarrow$ auto-estados de energia, com autovalores

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$

Elementos de matriz

• de $a, a^\dagger$ sabem de:

$$\begin{cases} a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \\ a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \end{cases}$$

~~$\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$~~

$$\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$$

$$\langle n|a|m\rangle = \sqrt{m} \delta_{n,m-1}$$

$$\langle n|a^\dagger|m\rangle = \sqrt{m+1} \delta_{n,m+1}$$

• Para obter x, p em funç. de $a, a^\dagger$ para obter elementos de matriz de x, p :

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

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

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

- ~~x~~ ~~p~~ ^{x} ~~p~~ ^{p} diagonais na base $\{|n\rangle\}$ - $x, p, a, a^\dagger$ n.õ comuta com

N (ou H)

Autoestados de energia na base de posição

• O est. fundamental $|0\rangle$ satisfaz $a|0\rangle = 0$

• Na representação x : $\langle x'|a|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \langle x'| (x + \frac{i\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx}) |0\rangle = 0$

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

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

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

$$x' + x_0^2 \frac{d}{dx'} \langle x'|0\rangle = 0 \quad \text{com } x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \text{ e' comprimento característico da oscilação.}$$

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

• As funções de onda de est. excitados são obtidos atuando com $(a^\dagger)^n \langle x'|0\rangle$:

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

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

Variancias de x, p

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

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

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

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

- Des resultados p/ $\langle n | x | n \rangle = \langle n | p | n \rangle = 0$

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

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

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

Evolução temporal

- Nesta seção vamos trabalhar com a representação de Heisenberg - todos os operadores atuam ~~na~~ ~~esta~~ nesta representação.

- Eqs. de movimento de Heisenberg:

$$\frac{dp}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [p, H] = \frac{1}{i\hbar} [p, V(x)] = \frac{1}{i\hbar} \left(-i\hbar \frac{dV(x)}{dx} \right) = -m\omega^2 x$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [x, H] = \frac{1}{i\hbar} [x, \frac{p^2}{2m}] = \frac{1}{i\hbar} \left(i\hbar \frac{d}{dp} \left(\frac{p^2}{2m} \right) \right) = \frac{p}{m}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{dp}{dt} = -m\omega^2 x \\ \frac{dx}{dt} = \frac{p}{m} \end{cases}$$

← eqs. diferenciais acopladas. Re-escrevemos em termos dos operadores $a, a^\dagger$; obtendo 2 eqs. desacopladas:

$$\Leftrightarrow \begin{cases} \frac{da}{dt} = -i\omega a \\ \frac{da^\dagger}{dt} = i\omega a^\dagger \end{cases}$$

soluções:

$$\Rightarrow \begin{cases} a(t) = a(0) \exp(-i\omega t) \\ a^\dagger(t) = a^\dagger(0) \exp(i\omega t) \end{cases}$$

Repara que $N = a^\dagger a$ é

indep. de t , como deveria ser.

Reescrevendo de volta em termos de ~~posição~~ $x(t), p(t)$:

$$\left. \begin{aligned} x(t) + \frac{i p(t)}{m\omega} &= x(0) e^{-i\omega t} + i \left(\frac{p(0)}{m\omega} \right) e^{-i\omega t} \\ x(t) - \frac{i p(t)}{m\omega} &= x(0) e^{i\omega t} - i \left(\frac{p(0)}{m\omega} \right) e^{i\omega t} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} x(t) = x(0) \cos \omega t + \frac{p(0)}{m\omega} \sin \omega t \\ p(t) = -m\omega x(0) \sin \omega t + p(0) \cos \omega t \end{cases}$$

- $x(t)$ e $p(t)$ oscilam como as grandezas clássicas.

$$x(t) = U(t)^{\dagger} x(0) U(t) = e^{i\frac{Ht}{\hbar}} x(0) e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}$$

- Para analisar esta expressão, vamos usar uma variante do resultado que provamos na lista, conhecida como Lemma de Baker-Hausdorff:

[Seja G Hermitiano e λ real.

Seja G Hermitiano e λ real.

$$e^{i\lambda G} A e^{-i\lambda G} = A + i\lambda [G, A] + \frac{(i\lambda)^2}{2!} [G, [G, A]] + \dots + \frac{(i\lambda)^n}{n!} [G, [G, [G, \dots [G, A]]]]$$

Ademais vale:

• Aplika p/ action $x(t)$.

$$e^{\frac{iHt}{\hbar}} x(0) e^{-\frac{iHt}{\hbar}} = x(0) + \left(\frac{it}{\hbar}\right) [H, x(0)] + \frac{it^2}{2! \hbar^2} [H, [H, x(0)]] + \dots$$

- a avaliação dos comutadores ~~entre~~ se faz usando

$$\left\{ \begin{aligned} [H, x(\omega)] &= -\frac{i\hbar p(\omega)}{m} \\ [H, p(\omega)] &= i\hbar m \omega^2 x(\omega) \end{aligned} \right.$$

ex. $[H, x(\omega)] = [p^2(\omega), x(\omega)] = 2i\hbar p(\omega)$

$$2x. \quad [H, x(\omega)] \sim [p^2(\omega), x(\omega)] = 2i\hbar p(\omega)$$

$$Z_H([H, x(t)]) \sim [x(t), p(t)] = Z_A(t) \times(t)$$

$$\Rightarrow e^{\frac{j\omega t}{\hbar}} x(t) e^{-\frac{j\omega t}{\hbar}} = x(t) + \frac{p(t)}{m} t - \frac{1}{2!} t^2 \omega^2 x(t) - \frac{1}{3!} t^3 \omega^2 \frac{p(t)}{m} + \dots$$

$$= x(0) \cos \omega t + \left(\frac{\dot{x}(0)}{\omega} \right) \sin \omega t = x(t)$$

← Como tínhamos encontrado na outra abordagem.

Então $x(t)$ oscila, $\langle x(t) \rangle = 0$ para auto-estado de energia $\rightarrow$ oscilação - afinal, é est. estacionário. Para termos oscilações precisamos de superposição de pelo menos 2 auto-estados, por exemplo

$$|x\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle.$$

• É possível construir superposições de $\{|n\rangle\}$ que oscilam como o OH clássico, mas para nós precisamos estudar estados coerentes.

Estados coerentes do OH [Chen-Tannoudji 6v]

- São estados próximos aos estados clássicos do OH, no sentido que $\langle p \rangle_t$ seguem os valores de um OH clássico.

OH clássico

- $$\begin{cases} \ddot{x}(t) = \frac{p(t)}{m} \\ \dot{p}(t) = -m\omega^2 x(t) \end{cases}$$
 Para simplificar, defino variáveis adimensionais

$$\begin{cases} x_c(t) = \beta x(t) \\ p_c(t) = \frac{1}{\hbar\beta} p(t) \end{cases} \quad \text{com } \beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \dot{x}_c(t) = \omega p_c(t) \\ \dot{p}_c(t) = -\omega x_c(t) \end{cases}$$

Agora mudamos de variáveis:

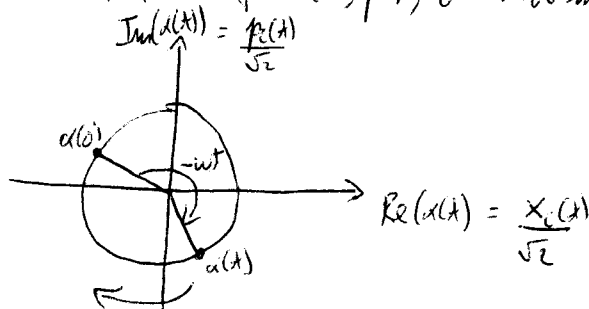
$$\Leftrightarrow \dot{\alpha}(t) = -i\omega \alpha(t)$$

$$\alpha(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_c(t) + i p_c(t))$$

Solução: $\alpha(t) = \alpha_0 e^{-i\omega t}$

$$\text{com } \alpha_0 = \alpha(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [x_c(0) + i p_c(0)]$$

- $x(t)$ representa, no espaço de fase (x, p) , o movimento do OH:



- Podemos escrever $x_c(t)$ e $p_c(t)$ em funç de α, α^* : $\text{Ver } (*)$

$$x_c(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha_0 e^{-i\omega t} + \alpha_0^* e^{i\omega t}] \quad p_c(t) = -\frac{i}{\sqrt{2}} [\alpha_0 e^{-i\omega t} - \alpha_0^* e^{i\omega t}]$$

- A energia também: $E = \frac{p_c^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x_c^2 = \frac{\hbar\omega}{2} (x_c^2(0) + p_c^2(0))$

$$\Rightarrow E_{\text{uso}} = \hbar\omega |\alpha_0|^2$$

- Para OH clássicos, $|\alpha_0|^2 \gg 1$.

Condições que definem estados quase-clássicos

- Como fiz no OH clássico, redefino $\hat{x}$ e $\hat{p}$ em "versões" adimensionais.

$$\hat{x}_a = \beta \hat{x}$$

$$\hat{p}_a = \frac{1}{\hbar\beta} \hat{p}$$

Vimos que podemos definir $a, a^\dagger$ tais que

$$\begin{cases} \hat{x}_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \\ \hat{p}_a = \frac{-i}{\sqrt{2}}(a - a^\dagger) \end{cases} \quad (C)$$

com $\frac{da}{dt} = -i\omega a \Rightarrow a(t) = a(0)e^{-i\omega t} \Rightarrow \langle a(t) \rangle = \langle a(0) \rangle e^{-i\omega t} \quad (I)$

para $a^\dagger$ $\langle a^\dagger(t) \rangle = \langle a^\dagger(0) \rangle e^{i\omega t} \quad (II)$

(Analogamente à eq. clássica $\dot{x} = \omega x \Rightarrow x(t) = x_0 e^{i\omega t}$) $\Rightarrow \langle a^\dagger(t) \rangle = \langle a(0) \rangle^* e^{i\omega t}$

- Substituo (I) e (II) em (C):

$$\begin{cases} \langle \hat{x}_a(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\langle a(0) \rangle e^{-i\omega t} + \langle a(0) \rangle^* e^{i\omega t} \right] \\ \langle \hat{p}_a(t) \rangle = \frac{-i}{\sqrt{2}} \left[\langle a(0) \rangle e^{-i\omega t} - \langle a(0) \rangle^* e^{i\omega t} \right] \end{cases}$$

- Comparo com eqs. clássicas - ω que $\begin{cases} \langle \hat{x}_a(t) \rangle = x_c(t) \\ \langle \hat{p}_a(t) \rangle = p_c(t) \end{cases}$ e meço e vejo que:

$\langle a(0) \rangle = x_0 \Rightarrow \langle \Psi(0) | a | \Psi(0) \rangle = x_0 \leftarrow 1^\circ \text{ condição p/ est. semi-clássico.}$

Também que $\langle H \rangle = \hbar\omega \langle a^\dagger a \rangle + \frac{\hbar\omega}{2} = \hbar\omega |x_0|^2 \leftarrow \text{é clássica.}$

Depois tanto $\frac{\hbar\omega}{2} \ll |x_0|^2 \hbar\omega$:

$\Rightarrow \langle \Psi(0) | a^\dagger a | \Psi(0) \rangle = |x_0|^2 \leftarrow 2^\circ \text{ condição.}$

- Veremos que as 2 condições são suficientes p/ encontrar est. ^{quase}clássicos $|\Psi(t)\rangle$.

— Estados quase-clássicos não auto-estados de a

• Defino operador $b(x_0) = a - x_0 \Rightarrow b^\dagger(x_0)b(x_0) = a^\dagger a - x_0 a^\dagger - x_0^* a + x_0^* x_0$

$$\Rightarrow \langle \psi(0) | b^\dagger(x_0) b(x_0) | \psi(0) \rangle = \underbrace{\langle \psi(0) | a^\dagger a | \psi(0) \rangle}_{\text{cond. 2}} - x_0 \underbrace{\langle \psi(0) | a^\dagger | \psi(0) \rangle}_{\text{cond. 1}} - x_0^* \underbrace{\langle \psi(0) | a | \psi(0) \rangle}_{\text{cond. 1}} + x_0^* x_0$$

$$= \alpha_0 \quad (\text{cond. 1})$$

$$= x_0 x_0^* - x_0 x_0^* - x_0^* x_0 + x_0^* x_0 = 0$$

$$\Rightarrow b(x_0) | \psi(0) \rangle = 0 \quad [\text{O cálculo acima é a norma deste ket}]$$

$$\Rightarrow a | \psi(0) \rangle = x_0 | \psi(0) \rangle$$

$\Rightarrow$ Est. quase-clássico ~~relacionado~~ com cond. inicial x_0 e $| \psi(0) \rangle$ ~~preciso~~
 = (auto-est. de a com autovalor x_0)

• NOTAÇÃO: Daqui para a frente:

$$\underline{a | \alpha \rangle = \alpha | \alpha \rangle}$$

• Propriedades dos estados $| \alpha \rangle$:

A) Expansão de $| \alpha \rangle$ na base de energia $\{ | n \rangle \}$

$$| \alpha \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(\alpha) | n \rangle, \quad a | \alpha \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n(\alpha) \sqrt{n} | n-1 \rangle \stackrel{j=n-1, n=j+1}{=} \sum_{j=0}^{\infty} c_{j+1}(\alpha) \sqrt{j+1} | j \rangle$$

$$= \alpha | \alpha \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} \alpha c_j(\alpha) | j \rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{c_{j+1}(\alpha) = \frac{\alpha}{\sqrt{j+1}} c_j(\alpha)} \quad \leftarrow \text{relação de recorrência p/ } c_j(\alpha)$$

$$c_1 = \frac{\alpha}{\sqrt{1}} c_0; \quad c_2 = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} c_1 = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \frac{\alpha}{\sqrt{1}} c_0 = \frac{\alpha^2}{\sqrt{2}} c_0 \Rightarrow \boxed{c_n(\alpha) = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0(\alpha)}$$

• Se fixarmos c_0 , $c_n(\alpha_n)$ também etc fixo. Escolhamos $c_0(\alpha)$ real e positivo.

• Normalizaç. $\sum_n |c_n(\alpha)|^2 = 1$

$$\Rightarrow |c_0(\alpha)|^2 \sum_n \frac{|k|^2 n}{n!} = |c_0(\alpha)|^2 e^{|k|^2} = 1 \quad \Rightarrow c_0(\alpha) = e^{-\frac{|k|^2}{2}}$$

$$\Rightarrow |\alpha\rangle = e^{-\frac{|k|^2}{2}} \sum_n \frac{k^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

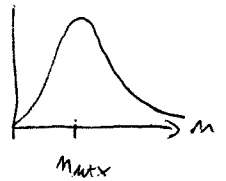
← est. quase-clássico; auto-est. de a com autovalor α .

B) Energia de estados coerentes

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

• Probabilidade de obtermos $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ na medição de energia:

$$P_n(\alpha) = |c_n(\alpha)|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2} \leftarrow \text{distrib. de Poisson } p_n$$



• Como $P_n(\alpha) = \frac{|\alpha|^2}{n} P_{n-1}(\alpha)$, $P_n(\alpha)$ é máximo

quando $n = n_{\text{max}} = \text{parte inteira de } |\alpha|^2$.

• $\langle H \rangle_\alpha = \sum_n P_n(\alpha) (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$. É mais fácil de avaliar assim:

$$\langle a^\dagger a \rangle = \alpha^* \langle a \rangle \Rightarrow \langle a^\dagger a \rangle = |\alpha|^2 \Rightarrow \langle H \rangle_\alpha = \hbar\omega \langle a^\dagger a + \frac{1}{2} \rangle = \hbar\omega \left(|\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right)$$

c) Estados coerentes são o est. fundamental deslocado.

• Vamos definir $D(\alpha) = e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a}$

- UNITÁRIO - $D^\dagger(\alpha) = e^{\alpha^* a - \alpha a^\dagger} \Rightarrow D D^\dagger = D^\dagger D = \mathbb{1}$.

• Agora usamos a "fórmula útil" de Lippman-Schwinger?

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]}$$

$$\rightarrow D(\alpha) = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a}$$

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]}$$

com $A = \alpha a^\dagger$, $B = -\alpha^* a$

$$[\alpha a^\dagger, -\alpha^* a] = -\alpha \alpha^* [a^\dagger, a] = -\alpha \alpha^* (-1) = \alpha \alpha^*$$

• Aplicando $D(\alpha)$ em $|0\rangle$:

• Aplicando $D(\alpha)$ em $|0\rangle$:

- Temos que $e^{-\alpha a^\dagger} |0\rangle = \left(1 - \alpha a^\dagger + \frac{\alpha^2}{2!} a^{\dagger 2} + \dots\right) |0\rangle = |0\rangle$

$$\Rightarrow D(\alpha)|0\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \underbrace{e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle}_{\sum_n \frac{(\alpha a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle} = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^n}{n!} \underbrace{a^{\dagger n} |0\rangle}_{\sqrt{n!} |n\rangle} = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = |\alpha\rangle$$

$\Rightarrow D(\alpha)|0\rangle = |\alpha\rangle$ • $D(\alpha)$ é $\int \text{deslocamento de } \alpha \text{ no espaço de fase;}$
 controla $|\alpha\rangle$ a partir de $|0\rangle$

D) Evolução de valores esperados

• Você vai mostrar que os valores esperados de $\langle x \rangle$ e $\langle p \rangle$ evoluem como as variáveis clássicas, o que justifica chamarmos em estados coerentes de estados "quase clássicos" da OM quântica.

Potenciais e transformação de calibre

- Em mec. clássica, a força (e toda a dinâmica) depende somente do gradiente do potencial V - constantes relativas nes fazem diferença física. Qual a situação análoga em MQ?
- Usando a representação de Schrödinger, vamos comparar:

$$\left. \begin{aligned} |x, t\rangle &= \text{est. sob efeito de } V(\vec{x}) \\ |\widetilde{x}, t\rangle &= \text{est. sob efeito de } \widetilde{V}(\vec{x}) = V(\vec{x}) + V_0 \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{com mesmas cond.} \\ \text{inicial } |\widetilde{x}, t=0\rangle = |x, t=0\rangle \\ = |x\rangle \end{array}$$

- Aplicamos o op. de evolução temporal:

$$|\widetilde{x}, t\rangle = \exp\left[-i\left(\frac{p^2}{2m} + V(x) + V_0\right)\frac{t}{\hbar}\right]|x\rangle = \underbrace{\exp\left[-i\frac{V_0 t}{\hbar}\right]}_{\uparrow \text{ Nova fase.}} |x, t\rangle$$

$$\left. \begin{array}{l} - \text{H } V(\vec{x}) \text{ a fase adquirida por est. estacionários é } \exp(-i\frac{E t}{\hbar}) \\ - \text{H } \widetilde{V}(\vec{x}) \text{ a fase é } \exp(-i(E + V_0)\frac{t}{\hbar}) \end{array} \right\} \Rightarrow \widetilde{V} \text{ tem efeito de fazer } E_0 \rightarrow E_0 + V_0$$

- Evolução temporal de $\langle \vec{x} \rangle, \langle \vec{p} \rangle$ etc depende de diferenças de energia
 $\Rightarrow \widetilde{V}$ não muda nada, fisicamente.

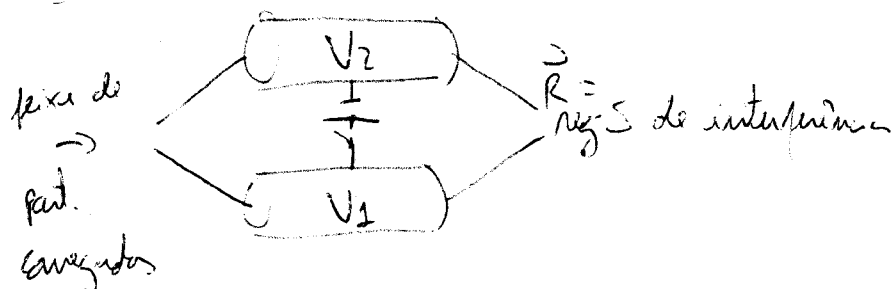
- Exemplo de transformação de calibre:

$$V(\vec{x}) \rightarrow V(\vec{x}) + V_0 \Rightarrow |x, t\rangle \rightarrow \exp\left[-i\frac{V_0 t}{\hbar}\right]|x, t\rangle$$

- Caso V_0 seja uniforme mas dependente do tempo, a generalização é a esperada:

$$|x, t\rangle \rightarrow \exp\left[-i \int_0^t dt' \frac{V_0(t')}{\hbar}\right]|x, t\rangle$$

• Diferenças de potencial são observáveis. Exemplo:



• Feixe α divide-se em 2 sub-feixes que passam por regiões onde há diferença de potencial $V_2 - V_1$. V é CTE em cada região $\Rightarrow \vec{E} = \vec{F} = 0$.

$$\Psi(\vec{R}) = \underbrace{\Psi_1 e^{i \frac{V_1 t}{\hbar}}}_{\text{feixe que passa por } V_1} + \underbrace{\Psi_2 e^{i \frac{V_2 t}{\hbar}}}_{\text{feixe que passa por } V_2} = d_1 + d_2$$

$\Rightarrow$ interferência na região $\vec{R}$, com intensidade do feixe modulada com $\cos(d_1 - d_2)$, $\sin(d_1 - d_2)$ com $d_1 - d_2 = \frac{1}{\hbar} \int_0^t dt [V_2(t) - V_1(t)]$

• A interferência é puramente quântica $\Rightarrow$ desaparece se $\hbar \rightarrow 0$ (oscilações infinitamente rápidas).

Gravidade em MQ

• Na mecl. clássica $m \ddot{\vec{x}} = -m \vec{\nabla} \phi_{\text{grav}} = -mg \hat{z}$
 $\uparrow$ massa inercial $\uparrow$ massa gravitacional

• Lembrando as massas $\left\{ \begin{array}{l} \text{inercial} \\ \text{gravitacional} \end{array} \right\}$ são iguais, o termo "m" cancela na eq. acima

• Na mecl. quântica $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + m \phi_{\text{grav}} \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$

- m não "desaparece" $\Rightarrow$ aparece na combinação $\frac{\hbar}{m}$.

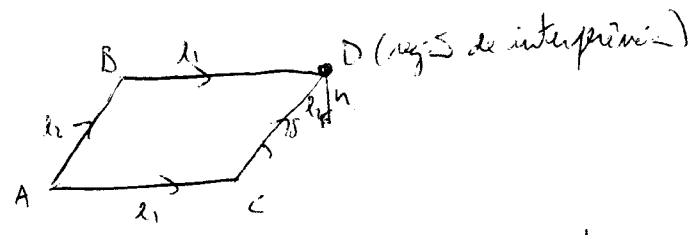
• Na eq. de Schrödinger podemos derivar o teorema de Ehrenfest:

$\frac{d^2 \langle \vec{x} \rangle}{dt^2} = -g \hat{z}$ $\leftarrow$ onde m desaparece

• Para observarmos efeitos não-clássicos da gravidade em MQ, precisamos procurar situações em que $\frac{\hbar}{m}$ aparece explicitamente.

$\Rightarrow$ Interferência quântica induzida pela gravidade

• Feixe de nêutrons $\vec{x}$ dividido em 2 feixes ~~que se recombinam~~



• θ = ângulo do retângulo ABCD c/ horizontal

$\left\{ \begin{array}{l} \text{caminho 1: ABD} \\ \text{caminho 2: ACD} \end{array} \right. \Rightarrow$ Diferença de fase ganha devido ao potencial $\overset{\text{diferença de}}{\text{potencial}} = V_{BD} - V_{AC} = mgl_2 \sin \theta$

$\Rightarrow \exp \left[-\frac{i \Delta V T}{\hbar} \right] = \exp \left[\frac{-i m_n g l_2 \sin \theta T}{\hbar} \right]$

onde T é o tempo gasto no trecho BD (ou AC).

• Diferença de fase:
$$\Delta\phi = \frac{-m_n g l_2 \sin\theta T}{\hbar} \quad (I)$$

- Comprimento de onda de de Broglie de n :
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_n v}$$

$$\Rightarrow T = \frac{l_1}{v} = \frac{l_1 m_n}{\hbar} \sin\theta \quad \text{subst. em (I)}$$

$$\Rightarrow \Delta\phi = - \left(\frac{m_n g l_1 l_2 \sin\theta}{\hbar^2} \right)$$

$\Rightarrow$ combinação $\frac{m}{\hbar}$ com speed.

- Essa interferência quântica devido à gravidade foi observada em 1975 por Colella, Overhauser & Werner.

Transformações de calibre no eletromagnetismo

- Se campos são indep. de t :

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi, \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad \begin{cases} \phi = \text{potencial} \\ \vec{A} = \text{potencial vetor} \end{cases}$$

- A Hamiltoniana de part. com carga e no campo EM é:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \right)^2 + e\phi \quad \leftarrow H \text{ clássica.}$$

- Na MQ ϕ e $\vec{A}$ são funções dos operadores. Podemos avaliar explicitamente o termo $()^2$:

$$\left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \right)^2 = \left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \right) \cdot \left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \right) = p^2 - \frac{e}{c} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \vec{A}^2$$

[Repare que o termo é Hermitiano]

- A dinâmica pode ser encontrada na representação de Heisenberg:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{[x_i, H]}{i\hbar} = \frac{p_i - \frac{eA_i}{c}}{m} \quad \left[\begin{aligned} [x, (p - \frac{e\vec{A}}{c})] &= [x, p] - \frac{e}{c} [x, p \cdot \vec{A}] \\ &= i\hbar \delta_{x,p} - \frac{e}{c} i\hbar A \\ &= i\hbar (p - \frac{eA}{c}) \end{aligned} \right]$$

Veja que $\frac{dx_i}{dt} \neq p_i$. Por isso chamamos

$\vec{\Pi} = m \frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c}$ de momento mecânico (ou cinético), enquanto

$\vec{p}$ é o momento canônico

- Diferença entre momento canônico e cinético:

$$\begin{cases} [p_i, p_j] = 0 \\ [\pi_i, \pi_j] = \left(\frac{i\hbar e}{c} \right) \epsilon_{ijk} B_k \end{cases} \quad \left\{ \begin{aligned} \epsilon_{ijk} &= \text{símbolo de Levi-Civita} \\ &= +1 \text{ se } ijk = (1,2,3), (3,1,2), (2,3,1) \\ &= -1 \text{ se } ijk = (1,3,2), (3,2,1), (2,1,3) \\ &= 0 \text{ se } i=j \text{ ou } j=k \text{ ou } k=i \end{aligned} \right.$$

-Veremos que $\vec{p}$ não é invariante por

transf. de calibre, enquanto $\vec{\Pi}$ é.

Resumo H usando $\vec{\Pi}$: $H = \frac{\vec{\Pi}^2}{2m} + e\phi$

É fácil mostrar que

$$\left(m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = \frac{d\vec{\Pi}}{dt} = e \left[\vec{E} + \frac{1}{2c} \left(\frac{d\vec{x}}{dt} \times \vec{B} - \vec{B} \times \frac{d\vec{x}}{dt} \right) \right] \right)$$

= vers quantica da força de Lorentz, à la Ehrenfest.

Modificações na eq. de continuidade

Vamos derivar a eq. de continuidade (de probabilidade e corrente de prob.) em MQ, e ver como ela muda no caso de elétrons em campo EM.

Eq. de Schrödinger: $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi$ (I) conjugando:

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

$$\textcircled{I} \cdot \Psi^* - \textcircled{II} \cdot \Psi : \quad i\hbar \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^* \right)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\Psi^* \Psi}_{\rho} + \vec{\nabla} \cdot \underbrace{\vec{j}}_{\vec{j}} = 0$$

com $\rho = \Psi^* \Psi$ a densidade de probabilidade,

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{-i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - (\vec{\nabla} \Psi^*) \Psi \right) \quad \text{a corrente de probabilidade .}$$

Se V não fosse real, não teríamos conservação de probabilidade - as vezes isso é usado ~~para~~ de forma propiciada p/ modelos para de partículas.