EVOLUÇÃO TEMPORAL DO ESTADO QUÂNTICO

$$|\Psi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_2 - t_1)\,|\Psi(t_1)\rangle \qquad (t_2 > t_1)$$

dois estados iniciais diferentes, $|\Psi(0)\rangle$ e $|\phi(0)\rangle$, deverão ser ortogonais

$$\langle \Psi(0)|\phi(0)\rangle = 0$$

e permanecer diferentes em qualquer outro instante t:

$$\langle \Psi(t)|\phi(t)\rangle = 0$$

$$\langle \Psi(t)| = \langle \Psi(0)|\hat{U}^+(t), \quad |\phi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\phi(0)\rangle$$

$$\Rightarrow \langle \Psi(0)|\hat{U}^+\hat{U}|\phi(0)\rangle = 0$$

Em particular, com dois elementos $|e_i\rangle$ e $|e_j\rangle$ de uma base ortonormal:

$$\langle e_i|\hat{U}^+\hat{U}|e_j\rangle = 0 \quad , \text{ se } i \neq j$$

$$\Rightarrow \langle \Psi(0)|\hat{U}^+\hat{U}|\phi(0)\rangle = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \Psi_i^*\phi_j \langle e_i|\hat{U}^+\hat{U}|e_j\rangle = \sum_{i=1}^{n} \Psi_i^*\phi_i \langle e_i|\hat{U}^+\hat{U}|e_i\rangle = 0$$

e também

$$\langle \Psi(0)|\phi(0)\rangle = \sum_{i=1}^{n} \Psi_i^*\phi_j = 0$$

para que estas duas últimas expressões sejam válidas para quaisquer dois kets diferentes, $\langle e_i|\hat{U}^+\hat{U}|e_i\rangle = 1$

$$\Rightarrow \langle e_i|\hat{U}^+\hat{U}|e_j\rangle = \delta_{ij} \quad \Rightarrow \boxed{\hat{U}^+\hat{U} = \hat{1}}$$

$\hat{U}^+$ é o inverso de $\hat{U}$, e $\hat{U}$ chama-se operador <u>unitário</u>.

$$\langle \Psi(t)|\phi(t)\rangle = \langle \Psi(0)|\hat{U}^+\hat{U}|\phi(0)\rangle = \langle \Psi(0)|\phi(0)\rangle$$

Ou seja, a sobreposição entre estados permanece igual em qualquer tempo t, e os estados normalizados permanecem sempre normalizados

$$\hat{U}(0) = \hat{1}$$

$$\hat{U}(\Delta t) = \hat{1} - i\Delta t\hat{G} \quad (\Delta t \to 0) \quad \Rightarrow \hat{U}^+(\Delta t) = \hat{1} + i\Delta t\,\hat{G}^+$$

$$\hat{U}^+(\Delta t)\hat{U}(\Delta t) = (\hat{1} + i\Delta t\hat{G}^+)(\hat{1} - i\Delta t\hat{G}) \overset{\Delta t \to 0}{=} \hat{1} + i\Delta t(\hat{G} - \hat{G}^+) = \hat{1} \text{ (unitário)}$$

$$\Rightarrow \hat{G}^+ = \hat{G} \quad (\hat{G} \text{ é um observável, com unidades de tempo}^{-1})$$

(sem a constante i, $\hat{G}$ não seria hermítico).

$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05457 \times 10^{-34} \frac{kg \cdot m^2}{s}$ tem unidades de energia x tempo

$\Rightarrow \hat{G} = \frac{\hat{H}}{\hbar}$, onde $\hat{H}$ é um observável com unidades de energia

(o fator $\frac{1}{2\pi}$ é para evitar a aparição de 2π em várias equações futuras).

$$\lim_{\Delta t \to 0} \hat{U}(\Delta t) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H}$$

$$\lim_{\Delta t \to 0} |\psi(t+\Delta t)\rangle = \lim_{\Delta t \to 0} \hat{U}(\Delta t)|\psi(t)\rangle = \left(\hat{1} - \frac{i}{\hbar}\Delta t \hat{H}\right)|\psi(t)\rangle = |\psi(t)\rangle - \frac{i}{\hbar}\Delta t \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

$$i\hbar \lim_{\Delta t \to 0} \frac{|\psi(t+\Delta t)\rangle - |\psi(t)\rangle}{\Delta t} = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle}$$ Equação de Schrödinger dependente do tempo

Observe-se que:

$$\frac{d|\psi\rangle}{dt} = \sum_{j=1}^{n} \frac{d\psi_i}{dt}|e_i\rangle \quad e \quad \langle\psi|\hat{H} = -i\hbar \frac{\partial\langle\psi|}{\partial t}$$

Consideremos um observável qualquer, $\hat{L}$.

$\langle\hat{L}\rangle = \langle\psi|\hat{L}|\psi\rangle$ (admitimos que $\hat{L}$ não depende de t, mas $\langle\hat{L}\rangle$ sim.)

$$\frac{d\langle\hat{L}\rangle}{dt} = \left(\frac{d\langle\psi|}{dt}\right)\hat{L}|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{L}\left(\frac{d|\psi\rangle}{dt}\right) = \frac{i}{\hbar}\left(\langle\psi|\hat{H}\hat{L}|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{L}\hat{H}|\psi\rangle\right)$$

$$\Rightarrow \frac{d\langle\hat{L}\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle\psi|[\hat{H},\hat{L}]|\psi\rangle$$

onde $[\hat{H},\hat{L}] = \hat{H}\hat{L} - \hat{L}\hat{H} = -[\hat{L},\hat{H}]$ é o <u>comutador</u> dos operadores $\hat{H}$ e $\hat{L}$

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

A semelhança com os parênteses de Poisson da mecânica clássica permite fazer a ponte entre as duas mecânicas.

Mecânica quântica | Mecânica clássica

$$[\hat{L},\hat{M}] \iff i\hbar\{L,M\}$$

$$\frac{d\langle\hat{L}\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\langle[\hat{L},\hat{H}]\rangle \iff \frac{dL}{dt} = \{L,H\}$$

Propriedades dos comutadores:

ⓐ $[\hat{A},\hat{B}] = -[\hat{B},\hat{A}]$

ⓑ $[\hat{A},\hat{A}] = \hat{0}$

ⓒ $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} + [\hat{A},\hat{B}]$

O comutador de dois observaveis obtém-se a partir dos respetivos parênteses de Poisson. Por exemplo,

$$[\hat{X},\hat{P}] = i\hbar\{X,P\} = i\hbar\left(\frac{\partial x}{\partial x}\frac{\partial p}{\partial p} - \overset{0}{\frac{\partial x}{\partial p}}\overset{0}{\frac{\partial p}{\partial x}}\right) = i\hbar$$

$\Rightarrow$ Não existem estados para os quais $P_j = 1$ para $\hat{X}$ e $\hat{P}$.
(não podem ser medidos com exatidão em simultâneo).

EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER INDEPENDENTE DO TEMPO

Seja $\{|E_j\rangle\}$ a base de vetores próprios de $\hat{H}$

$$\boxed{\hat{H}|E_j\rangle = E_j|E_j\rangle}$$ Equação de Schrödinger independente do tempo

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{n}\psi_j|E_j\rangle \Rightarrow \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \sum_{j=1}^{n}\frac{d\psi_j}{dt}|E_j\rangle = -\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{n}E_j\psi_j|E_j\rangle$$

$$\Rightarrow \frac{d\psi_j}{dt} = -\frac{i}{\hbar}E_i\psi_j$$

$$\psi_j(t) = \psi_j(0)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_jt}$$

$\left(e^{-\frac{i}{\hbar}E_jt} = \cos\left(\frac{E_j}{\hbar}t\right) - i\sin\left(\frac{E_j}{\hbar}t\right)\right.$
oscila com freq. angular $\left.\frac{E_j}{\hbar}\right)$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{j=1}^{n}\psi_j(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_jt}|E_j\rangle = \left(\sum_{j=1}e^{-\frac{i}{\hbar}E_jt}|E_j\rangle\langle E_j|\right)|\psi(0)\rangle$$

O OSCILADOR HARMÓNICO QUÂNTICO

Hamiltoniano: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{k}{2}\hat{x}^2$ (valores próprios E_n)

fica numa forma mais simétrica com a substituição:

$$\hat{X} = (mk)^{1/4}\hat{x} \quad , \quad \hat{P} = \frac{\hat{p}}{(mk)^{1/4}}$$

$$\Rightarrow \quad \hat{H} = \frac{\omega}{2}(\hat{P}^2 + \hat{X}^2) \quad , \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = \text{frequência angular}$$

Comutador de $\hat{X}$ e $\hat{P}$:

$$[\hat{X}, \hat{P}] = [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

observe-se que,

$$(\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P}) = \hat{X}^2 + \hat{P}^2 + i(\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X}) = \hat{X}^2 + \hat{P}^2 + i[\hat{X}, \hat{P}]$$
$$= \hat{X}^2 + \hat{P}^2 - \hbar$$

Define-se o operador: $\boxed{\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{X} + i\hat{P})}$

$$\Rightarrow \quad \hat{a}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{X} - i\hat{P})$$

$$\hat{a}^{\dagger}\hat{a} = \frac{1}{2\hbar}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 - \hbar) \quad \Rightarrow \quad \hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$$

Os operadores $\hat{a}$ e $\hat{a}^{\dagger}$ não são hermíticos, mas o operador,

$$\hat{N} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a} \qquad (\hat{N}^{\dagger} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a})$$

sim é hermítico, e sem unidades ($\hbar\omega$ tem unidades de energia).

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

antes de calcular os valores próprios de $\hat{N}$, é útil determinar os comutadores de $\hat{a}$ e $\hat{a}^{\dagger}$ com $\hat{N}$:

$$[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}] = \frac{1}{2\hbar}[\hat{X} + i\hat{P}, \hat{X} - i\hat{P}] = \frac{1}{2\hbar}\left(-i[\hat{X}, \hat{P}] + i[\hat{P}, \hat{X}]\right)$$
$$= \frac{1}{2\hbar}(\hbar + \hbar) = 1$$

$$[\hat{a},\hat{N}] = \hat{a}\hat{a}^{+}\hat{a} - \hat{a}^{+}\hat{a}^{2} = \left([\hat{a},\hat{a}^{+}] + \hat{a}^{+}\hat{a}\right)\hat{a} - \hat{a}^{+}\hat{a}^{2} = (1+\hat{a}^{+}\hat{a})\hat{a} - \hat{a}^{+}\hat{a}^{2}$$

$$\Rightarrow \boxed{[\hat{a},\hat{N}] = \hat{a}}$$

$$[\hat{a}^{+},\hat{N}] = \hat{a}^{+2}\hat{a} - \hat{a}^{+}\hat{a}\hat{a}^{+} = \hat{a}^{+2}\hat{a} - \hat{a}^{+}\left([\hat{a},\hat{a}^{+}] + \hat{a}^{+}\hat{a}\right) = \hat{a}^{+2}\hat{a} - \hat{a}^{+}(1+\hat{a}^{+}\hat{a})$$

$$\Rightarrow \boxed{[\hat{a}^{+},\hat{N}] = -\hat{a}^{+}}$$

Valores/vetores próprios de $\hat{N}$:

$\hat{N}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$; λ é real, porque $\hat{N}$ é hermítico

$$\Rightarrow \langle\lambda|\hat{N}|\lambda\rangle = \lambda\langle\lambda|\lambda\rangle = \lambda\,||\lambda\rangle|^{2}$$

mas $\langle\lambda|\hat{N}|\lambda\rangle$ também é igual a:

$$\langle\lambda|\hat{N}|\lambda\rangle = \langle\lambda|\hat{a}^{+}\hat{a}|\lambda\rangle = |\hat{a}|\lambda\rangle|^{2}$$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{|\hat{a}|\lambda\rangle|^{2}}{||\lambda\rangle|^{2}} \geq 0$$ (zero unicamente se $\hat{a}|\lambda\rangle$ for $|0\rangle$)

Os valores próprios de $\hat{N}$ são números reais positivos.

$$\hat{N}\hat{a}|\lambda\rangle = \left(\hat{a}\hat{N} - [\hat{a},\hat{N}]\right)|\lambda\rangle = (\hat{a}\hat{N} - \hat{a})|\lambda\rangle = (\lambda-1)\hat{a}|\lambda\rangle$$

ou seja, $\hat{a}|\lambda\rangle$ é também vetor próprio de $\hat{N}$, com valor próprio $\lambda-1$. Se um número real λ for valor próprio de $\hat{N}$, $\lambda-1$ também será. Como os valores próprios de $\hat{N}$ não podem ser negativos, conclui-se que os valores próprios de $\hat{N}$ deverão ser inteiros positivos.

$$\hat{N}\hat{a}^{+}|\lambda\rangle = \left(\hat{a}^{+}\hat{N} - [\hat{a}^{+},\hat{N}]\right)|\lambda\rangle = (\hat{a}^{+}\hat{N} + \hat{a}^{+})|\lambda\rangle = (\lambda+1)\hat{a}^{+}|\lambda\rangle$$

Ou seja, se um inteiro positivo, λ, é valor próprio de $\hat{N}$, $\lambda+1$ também é. Como tal, os valores próprios de $\hat{N}$ são todos os inteiros positivos: $\hat{N}|\lambda_n\rangle = \lambda_n|\lambda_n\rangle$

$\lambda_n = n$; $n = 1, 2, 3, \ldots$ e existe $|\lambda_0\rangle \neq |0\rangle$, tal que $\begin{cases} \hat{a}|\lambda_0\rangle = 0 \\ \hat{a}^{+}|\lambda_0\rangle = |\lambda_{=1}\rangle \end{cases}$

$$|\hat{a}|\lambda_n\rangle|^{2} = \langle\lambda_n|\hat{a}^{+}\hat{a}|\lambda_n\rangle = \langle\lambda_n|\hat{N}|\lambda_n\rangle = n \Rightarrow \boxed{\hat{a}|\lambda_n\rangle = \sqrt{n}\,|\lambda_{n-1}\rangle}$$

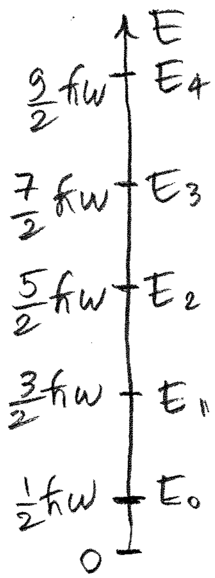
$$|\hat{a}^{+}|\lambda_n\rangle|^{2} = \langle\lambda_n|\hat{a}\hat{a}^{+}|\lambda_n\rangle = \langle\lambda_n|(\hat{N}+1)|\lambda_n\rangle = n+1 \Rightarrow \boxed{\hat{a}^{+}|\lambda_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\lambda_{n+1}\rangle}$$

Os valores próprios do Hamiltoniano $\hat{H}$ são $\hbar\omega$ vezes os valores próprios de $\hat{N}$, mais $\frac{1}{2}\hbar\omega$:

$$\Rightarrow \boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)} \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

E os vetores próprios de $\hat{H}$ são os mesmos vetores próprios $|\lambda_n\rangle$ de $\hat{N}$. No caso $n=0$, o vetor próprio de $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ é o ket $|E_0\rangle = |\lambda_0\rangle$ $(\neq |0\rangle)$.

Espetro de energia do oscilador harmónico



A diferença de energia entre dois nives consequtivos é: $E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$

e como, $\omega = 2\pi f$ (f=frequência)

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$

$$\Rightarrow \hbar\omega = hf$$

A energia do oscilador só pode variar em múltiplos inteiros do quantum de energia hf, que depende apenas da frequência f do oscilador.

A energia mínima é $\frac{1}{2}hf$, e não zero.

Problema 2

ⓐ Escreva os operadores $\hat{X}$ e $\hat{P}$ em função de $\hat{a}$ e $\hat{a}^\dagger$.

ⓑ Se o estado do sistema for $|\lambda_n\rangle$ (nivel E_n de energia) determine os valores esperados $\langle\hat{X}\rangle$, $\langle\hat{P}\rangle$, $\langle\hat{X}^2\rangle$ e $\langle\hat{P}^2\rangle$ (em função de $\hbar$ e n).

Sugestão: lembre que $\hat{a}|\lambda_n\rangle = \sqrt{n}\,|\lambda_{n-1}\rangle$,

$\hat{a}^\dagger|\lambda_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\lambda_{n+1}\rangle$, $\hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{N}$

e $\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{N} + \hat{1}$