

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

• Já vimos as propriedades de op. de 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.

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

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

• Mais adiante, o teorema de Ehrenfest justifica o fato das CTEs  $\ll$  dimensão de ação que aparecem em  $U(t_0 + dt, t_0)$  e  $\mathcal{L}(dx)$  serem o  $(\hbar)$ .

## Eq. de Schrödinger

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

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

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

$\Rightarrow$  Na forma de eq. diferencial:  $\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H U(t, t_0)} \quad \textcircled{I}$

= eq. diferencial pl o op. de evoluç. temporal

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

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

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

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{d}{dt} |\alpha, t_0; t\rangle = H |\alpha, t_0; t\rangle} \leftarrow \text{eq. Schrödinger } \textcircled{II}$$

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

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

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

Case 2:

•  $H$  depends on  $t$ , but  $[H(t), H(t')] = 0 \forall t, t'$ . Example: spin  $\frac{1}{2}$  in a field  $\vec{B} = B(t) \hat{z}$ .

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

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

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

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

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

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

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

$\exp( )$

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

como queriamos verificar.

Caso 3:  $H(x)$  dependente de  $x$  e arbitrário (MS necessariamente comuta p/  $x$ 's diferentes)

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

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

Soluç 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  $x$ ) é o mais simples, vamos assumir que este é o caso daqui para a frente.

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

Evolução de auto-estados de energia

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Rotina para resolver dinâmica p/  $H$  indep  $t$

① Achar simétricos 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 ~~Alta~~  $|\alpha, t_0=0; t\rangle = |K_i\rangle \exp\left(-\frac{iE_{K_i} t}{\hbar}\right)$   
 $\uparrow$  índices dos  $A_i$ 's,  $H$ .

Como valores esperados variam c/  $t$

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

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

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

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

• ~~Est.~~ Est. iniciais que são superposições dos  $|\alpha_i\rangle$  não são estacionários:

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

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

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

### Exemplo: presença de spin $\frac{1}{2}$

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

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

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

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

$$E_{\pm} = \mp \frac{e\hbar B}{2m_e c} \quad \text{para } | \uparrow \rangle, | \downarrow \rangle$$

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

- 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.  $|+\rangle$  sempre.

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

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

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

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

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

$\Rightarrow$  spin precessa 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 são 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  $U = \mathcal{T}(d\vec{x}) = \left(1 - \frac{i\vec{p}\cdot d\vec{x}}{\hbar}\right)$

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

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

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

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:

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

• 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:

$$\begin{aligned} \int_S \langle \alpha, t | A^{(S)} | \alpha, t \rangle_S &= \int_S \langle \alpha, t=0 | U^\dagger A U | \alpha, t=0 \rangle_S \\ &= \int_H \langle \alpha | A^{(H)} | \alpha \rangle_H \end{aligned}$$

Eq. de movimento na descr. de Heisenberg

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

~~$U = \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)$~~   
 ~~$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{-iH}{\hbar} U$~~   
 ~~$\frac{\partial U^\dagger}{\partial t} = \frac{iH}{\hbar} U^\dagger$~~

$$\begin{aligned} &= -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger H A^{(S)} U + \frac{1}{i\hbar} U^\dagger A^{(S)} H U \\ &= -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger H U U^\dagger A^{(S)} U + \frac{1}{i\hbar} U^\dagger A^{(S)} U U^\dagger H U \\ &= \frac{1}{i\hbar} [A^{(H)}, U^\dagger H U] \\ & \quad \quad \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{H^{(H)}} \end{aligned}$$

Usa:  $\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{-1}{i\hbar} H U$   
 $\frac{\partial U^\dagger}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} U^\dagger H$   
 e a eq de Schrödinger  
 $H U = E U$

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

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



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

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

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  $\frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})$

• Faz a discussões acima 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  $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$

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

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

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

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

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

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

o 2º resultado é prova de forma parecida.

## Part. livre na descrição de Heisenberg

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

$\bullet p_i$  comuta com qq. função dos  $p_j$ 's:  $\Rightarrow$

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

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

$\bullet$  Agora  $x_i$ :

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

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

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

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

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

$\bullet$  Aplique a rel. de incerteza p/  $x_i(t), x_i(0)$ :

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

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

- Adicionando  $V(x)$  à part. livre:

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

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

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

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

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

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

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

(IV) é o teorema de Ehrenfest, e é verdade p/ derivadas de Heisenberg de Schrödinger

- Os valores esperados se comportam como partícula clássica.

(valores esperados em os momentos).

## Vetores-base

- Como observáveis são função de  $t$  na descrição de Heisenberg, seus autovalores (uma base) também são. Vejamos isso com mais cuidado.

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

eq. de autovalores:  $U^\dagger A(0) U |a'(t)\rangle = a' |a'(t)\rangle$  ← autovalores de observáveis equivalentes não mudam

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

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

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

- 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 "reverso":  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |a'(t)\rangle_H = -H |a'(t)\rangle_H$

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

- A representação espectral é consistente:

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

- 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~~ autoestados de A com autovalor  $a_i$ . No tempo  $t$ , qual é a [amplitude de probabilidade] de encontramos ~~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:

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

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  $\Delta t$  aqui não tem a interpretação de variância (dispersão) estatística.

• Formalmente, parece com ~~o princípio da~~ a relação de incerteza p/ observáveis que não comutam, mas é diferente. Vamos derivá-la, dando a interpretação correta 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:  $\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2$

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

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

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

• Na eq. acima  $\langle (\Delta H)^2 \rangle$  é a variância da energia,

e definamos  $(\Delta t)^2 = \frac{\langle (\Delta Q)^2 \rangle}{\left| \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right|^2}$ . De acordo com essa definição,

$\langle (\Delta Q)^2 \rangle = \left| \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right|^2 \Delta t^2$ , em nra,  $\Delta t$  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 definiçã de  $\Delta t$ , temos

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

← Princípio de incerteza  
energia/tempo.

Exemplos de aplicaçã:

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

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

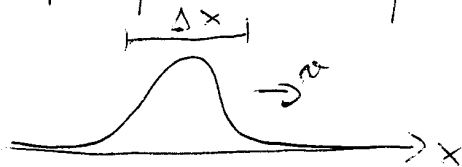
Prob. de medir em  $|\beta\rangle$   $|\langle \beta | \alpha, t \rangle|^2 = |a \langle \beta | E_1 \rangle e^{-iE_1 t/\hbar} + b \langle \beta | E_2 \rangle e^{-iE_2 t/\hbar}|^2$

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

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

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

II)  $\Delta t$  pl 1 pacote de onda parva



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

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

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

## 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

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

- 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

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

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

- Por que os nomes criação/aniquilação?



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

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

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

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

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

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

↳ a ser determinada.

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

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

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

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

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

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

⋮

$$- \text{ } n \geq 0 \text{ pois } n = \langle n | N |n\rangle = \langle n | a^\dagger a |n\rangle \geq 0$$

- Se  $n \in \mathbb{N}$  for inteiro  $\geq 0$ , a seq. continua independentemente, levando a auto-est. com  $n < 0$  (proibidas)

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

•  $n=0 \Rightarrow$  est. 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:  $a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$

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

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

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

← auto-estados de energia, com autovalores

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

### Elementos de matriz

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

•  ~~$\langle n|a|n\rangle = \sqrt{n}$~~

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

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

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

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

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

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

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

•  ~~$x$~~   ~~$p$~~  ~~no~~ 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  $x$ :  $\langle x|a|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \langle x|(x + \frac{i\hbar}{m\omega})|0\rangle = 0$

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

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

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

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

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

• As funções de onda de est. excitados são obtidas 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:  $\langle x|n\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}} \frac{1}{(x_0)^{n+1/2}} \left(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'}\right)^n \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right]$

## - Variancias de $x, p$

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

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

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

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

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

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

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

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

# Evolução Temporal

• Nesta seção vamos trabalhar com a representação de Heisenberg - todos os operadores abaixo ~~em~~ ~~esta~~ nesta representação.

• Eqs. de movimento de Heisenberg

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

$V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$

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

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

← 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:  
 $\Rightarrow \begin{cases} a(t) = a(0) \exp(-i\omega t) \\ a^\dagger(t) = a^\dagger(0) \exp(i\omega t) \end{cases}$  // Repare que  $N = a^\dagger a$  é indep. de  $t$ , como deveria ser.

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

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

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

- Vamos obter novamente  $x(t)$ , de forma alternativa.

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

- Para analisar esta expressão, vamos usar uma variante do resultado que procuramos na lista, conhecido como Lema de Baker-Hausdorff:

Seja  $G$  Hermitiano e  $A$  real.

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

- Aplique  $\hat{H}$  sobre  $x(t)$ .

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

- a análise dos comutadores ~~repetida~~ se faz usando

$$\begin{cases} [H, x(0)] = -\frac{i\hbar p(0)}{m} \\ [H, p(0)] = i\hbar m \omega^2 x(0) \end{cases}$$

ex:  $[H, x(0)] \sim [p(0), x(0)] = -i\hbar p(0)$

$[H, [H, x(0)]] \sim [x(0), p(0)] = i\hbar x(0)$

$$\Rightarrow e^{\frac{iHt}{\hbar}} x(0) e^{-\frac{iHt}{\hbar}} = x(0) + \frac{p(0)}{m} t - \frac{1}{2!} t^2 \omega^2 x(0) - \frac{1}{3!} t^3 \frac{\omega^2 p(0)}{m} + \dots$$

$$= \left[ x(0) \cos \omega t + \left( \frac{p(0)}{m\omega} \right) \sin \omega t \right] = x(t)$$

← Como tínhamos encontrado na outra abordagem.

- Embora  $x(t)$  oscile,  $\langle x(t) \rangle = 0$  para auto-estados de energia  $\rightarrow$  não oscila - afinal, é est. estacionário. Para termos oscilações precisamos de superposições 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 isso precisamos estudar estados coerentes.

# - Estados coerentes do OH [Cohen-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  $\begin{cases} x_c(t) = \beta x(t) \\ p_c(t) = \frac{1}{\hbar\beta} p(t) \end{cases}$  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:

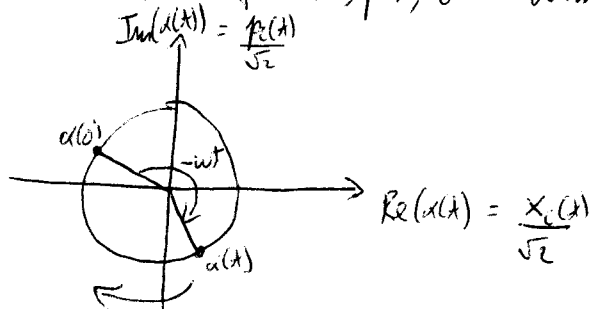
$$\Leftrightarrow \dot{\alpha}(t) = -i\omega \alpha(t)$$

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

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

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

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



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

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

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

$$\Rightarrow E = \hbar\omega \left( \frac{|\alpha_0|^2}{2} + \frac{1}{2} \right)$$

- 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:

$$\begin{cases} \hat{x}_a = \beta \hat{x} \\ \hat{p}_a = \frac{1}{\hbar\beta} \hat{p} \end{cases}$$

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

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

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

- faz  $a^\dagger \Rightarrow \langle a^\dagger(t) \rangle = \langle a^\dagger(0) \rangle e^{i\omega t} \quad \textcircled{II}$

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

- Substitua  $\textcircled{I}$  e  $\textcircled{II}$  em  $\textcircled{C}$ :

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

- Compare com eqs. clássicas -  $\omega$  que  $\left. \begin{cases} \langle \hat{x}_a(t) \rangle = x_c(t) \\ \langle \hat{p}_a(t) \rangle = p_c(t) \end{cases} \right\}$  e  $\left. \begin{matrix} \text{magnão e} \\ \text{magnão que} \end{matrix} \right\}$

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

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

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

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

- Veremos que as 2 condições são suficientes para encontrar est. quase-clássico  $|\Psi(t)\rangle$



- Estados quasi-clássicos não auto-estados de  $a$

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

$$\Rightarrow \langle \psi(0) | b^\dagger(x_0) b(x_0) | \psi(0) \rangle = \underbrace{\langle \psi(0) | a^\dagger a | \psi(0) \rangle}_{\text{cond. 2}} - x_0 \underbrace{\langle \psi(0) | a^\dagger | \psi(0) \rangle}_{\text{cond. 1}} - x_0^* \underbrace{\langle \psi(0) | a | \psi(0) \rangle}_{\text{cond. 4}} + x_0^* x_0$$

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

$$\Rightarrow \langle \psi(0) | \psi(0) \rangle = 0 \quad [\text{O cálculo acima é a norma de } \psi(0)]$$

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

$\Rightarrow$  Est. quasi-clássico ~~de~~ com cond. inicial  $x_0$  é  $| \psi(0) \rangle$  ~~pacim.~~  
= (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 fixamos  $c_0$ ,  $c_n(\alpha)$  também etc. fixo. Escolhamos  $c_0(\alpha)$  real e positivo.

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

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

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

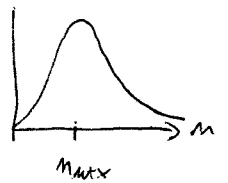
← est. quase-clássico; auto-est. de  $a$  com autovalor  $\alpha$ .

### 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:

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

c) Estados coerentes são o est. fundamental transformado.

• 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 lista?

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

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

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

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

$\Rightarrow D(\alpha)|0\rangle = |\alpha\rangle$  •  $D(\alpha)$  é deslocamento de  $x$  no espaço de fase; contém  $|\alpha\rangle$  a partir de  $|0\rangle$

D) Evoluç<sup>o</sup> de valores esperados

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

## Potenciais e transformações de calibre

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

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

- Após o op de evolução temporal:

$$|\tilde{x}, t\rangle = \exp\left[-i\left(\frac{p^2}{2m} + V(x) + V_0\right)\frac{t}{\hbar}\right] |x\rangle = \underbrace{\exp\left[-\frac{iV_0 t}{\hbar}\right]}_{\uparrow \text{ Nova fase.}} |x, t\rangle$$

-  $H V(\vec{x})$  a fase adquirida por est.

estacionária é  $\exp(-i\frac{Et}{\hbar})$

-  $H(\tilde{V}(\vec{x}))$  a fase é  $\exp(-i(E+V_0)\frac{t}{\hbar})$

$\Rightarrow \tilde{V}$  tem efeto de fazer  
 $E_0 \rightarrow E_0 + V_0$

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

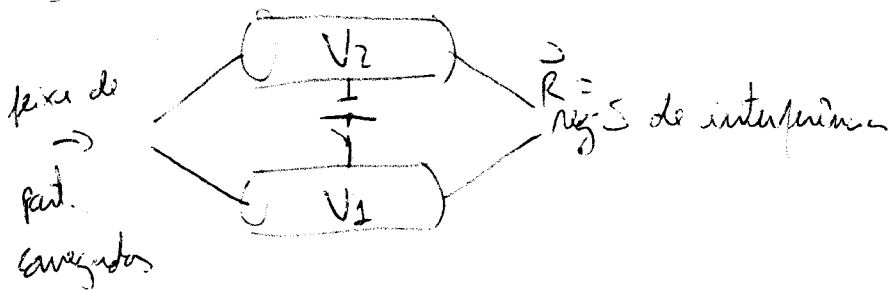
- Exemplo de transformação de calibre:

$$V(\vec{x}) \rightarrow V(\vec{x}) + V_0 \Rightarrow |x, t\rangle \rightarrow \exp\left[-\frac{iV_0 t}{\hbar}\right] |x, t\rangle$$

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

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

• Diferença de potencial são observáveis. Exemplo:



• Feixe  $\alpha$  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  $\Rightarrow \vec{E} = \vec{F} = 0$ .

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

$\Rightarrow$  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  $m \ddot{\vec{x}} = -m \vec{\nabla} \phi_{grav} = -mg \hat{z}$

↑ massa inercial ↑ massa gravitacional

• Lembrando as massas inercial e gravitacional } são iguais, o termo "m" cancela na eq. acima

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

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

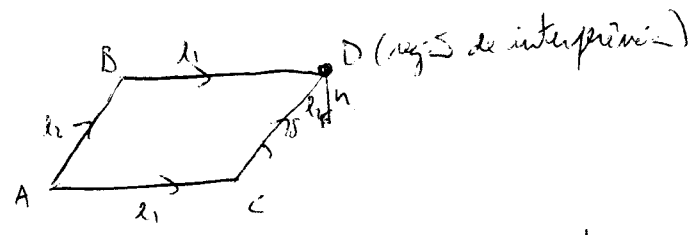
• Na eq. de Schrödinger podemos derivar o Teorema de Ehrenfest:

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

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

⇒ Interferência quântica induzida pela gravidade

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



•  $\theta =$  ângulo dos retângulos ABCD  $\parallel$  horizontal

{ caminho 1: ABD  
caminho 2: ACD

⇒ Diferença de fase ganha devido ao potencial  $\Delta V = V_{BD} - V_{AC} = mng l_2 \sin \theta$

↑ diferença de potencial

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

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

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

$$\Delta \phi =$$

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

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

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

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

- Esta interpretação quântica devido à gravidade foi demonstrada em 1975 por Colella, Overhauser & Werner.



# Transformações de calibre no eletromagnetismo

- Se campos são indep. de t:

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi, \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad \left\{ \begin{array}{l} \phi = \text{potencial} \\ \vec{A} = \text{potencial vetor} \end{array} \right.$$

- 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  $\phi$  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:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{[x_i, H]}{i\hbar} = \frac{p_i - \frac{eA_i}{c}}{m} \quad \left[ \begin{array}{l} [x, (p - \frac{e\vec{A}}{c})^2] = [x, p^2] - \frac{e}{c} \cdot 2[x, pA] \\ = i\hbar 2p - 2\frac{e}{c} i\hbar A \\ = 2i\hbar (p - \frac{eA}{c}) \end{array} \right]$$

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:

$$\left\{ \begin{array}{l} [p_i, p_j] = 0 \\ [\pi_i, \pi_j] = \left( \frac{i\hbar e}{c} \right) \epsilon_{ijk} B_k \end{array} \right.$$

$\epsilon_{ijk}$  = símbolo de Levi-Civita  
 $= +1$  se  $ijk = (1,2,3), (3,1,2), (2,3,1)$   
 $= -1$  se  $(1,3,2), (3,2,1), (2,1,3)$   
 $= 0$  se  $i=j$  ou  $j=k$  ou  $k=i$

-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

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

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

Modificações na eq. de continuidade

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

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

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

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

$\Rightarrow \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$

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

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

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

Com  $\vec{A}$  modifica a eq. de continuidade

• Temos  $\circ H = \frac{\Pi^2}{2m} + e\phi$ . Vamos "sandwichar"  $H$  entre  $\langle \vec{x}' |$  e

Para isso, precisamos calcular  $|x, t\rangle$

$$\langle \vec{x}' | (\vec{p} - \frac{e\vec{A}(\vec{x}')}{c})^2 |x, t\rangle = (-i\hbar\vec{\nabla}' - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x}')) \langle \vec{x}' | (\vec{p} - \frac{e\vec{A}(\vec{x}')}{c}) |x, t\rangle$$

$$= (-i\hbar\vec{\nabla}' - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x}')) \cdot (-i\hbar\vec{\nabla}' - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x}')) \langle \vec{x}' |x, t\rangle \quad \text{, Agora } H \text{ completo:}$$

$$\Rightarrow \left[ \frac{1}{2m} (-i\hbar\vec{\nabla}' - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x}')) \cdot (-i\hbar\vec{\nabla}' - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x}')) \langle \vec{x}' |x, t\rangle + e\phi(\vec{x}') \langle \vec{x}' |x, t\rangle \right] = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{x}' |x, t\rangle$$

[eq. Schrödinger]

• Mesmo procedimento resulta na <sup>nova</sup> eq. de continuidade:

$$\frac{d\rho}{dt} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad \text{com } \rho = |\Psi|^2, \text{ mas com novo } \vec{j}:$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\Psi^* \vec{\nabla}' \Psi) - \frac{e}{mc} \vec{A} |\Psi|^2$$

j anterior

como esperamos por causa da substituição  $\vec{\nabla}' \rightarrow \vec{\nabla}' - \frac{i\hbar}{\hbar c} \vec{A}$

• Se escrevermos  $\Psi = \sqrt{\rho} \exp(iS/\hbar)$ ,  $\vec{j}$  acima fica com esta forma:

$$\vec{j} = \frac{\rho}{m} (\vec{\nabla}' S - \frac{e\vec{A}}{c})$$

↳ Note que  $\int d^3x' \vec{j} = \frac{1}{m} \langle \vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \rangle = \frac{\langle \Pi \rangle}{m}$  enquanto que

$$\int d^3x' \vec{j}_{\text{antigo}} = \frac{\langle \vec{p} \rangle}{m}$$

# TRANSFORMAÇÕES de Calibre [BAU 11.2]

• Na EM clássico, transformações de calibre são do tipo:

$$\left. \begin{aligned} \text{(I)} \quad \vec{A} &\rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} \chi \\ \text{(II)} \quad \phi &\rightarrow \phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \end{aligned} \right\} \text{ e não mudam } \vec{E}, \vec{B}.$$

• Na MQ ~~temos~~  ~~$\vec{A} = \vec{A}(\vec{r})$~~ ,  ~~$\phi = \phi(\vec{r})$~~  temos a mesma situação, mas agora temos também modificações da função de onda por uma fase global que não altera valores esperados.

$$\text{(III)} \quad \psi \rightarrow \psi' = \psi e^{i\left(\frac{q}{\hbar c}\right)\chi}$$

• As 3 transformações I, II e III são o que chamamos de Transf. de calibre na MQ.

• Precisamos mostrar que a eq. de Schrödinger é invariante por transf. de calibre.

$$\text{Eq. original: } \frac{1}{2m} \left( -i\hbar \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 \psi + q\phi \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad \text{(IV)}$$

$$\text{Eq. transformada: } \frac{1}{2m} \left( -i\hbar \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 \psi' + q\phi \psi' = i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} \quad \text{(V)}$$

Vamos ver que (V) é equivalente a (IV).

- Primeiro, vamos analisar os 2 termos:

$$q\phi'\psi' = q\left(\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t}\right) e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi} \psi = q\phi e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi} \psi - \frac{q}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi} \psi$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left( e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi} \psi \right) = i\hbar \left[ \frac{\partial}{\partial t} \left( e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi} \right) \psi + e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] = \\ &= \cancel{-\frac{q}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi} \psi} + i\hbar e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi} \frac{\partial \psi}{\partial t} \end{aligned}$$

⇒  $\square$  se cancelam; mas lado direito da eq. (V) ganha uma fase  $e^{i\frac{q}{\hbar c}\chi}$ .

• Agora vamos analisar

$$(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \psi = -i\hbar \vec{\nabla} (e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \psi) - \frac{q}{c} (\vec{A} + \vec{\nabla}x) e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \psi \quad \text{VII}$$

$$\vec{\nabla} (e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \psi) = \psi \vec{\nabla} e^{i\frac{q}{\hbar c}x} + e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \vec{\nabla} \psi$$

$$\psi \vec{\nabla} e^{i\frac{q}{\hbar c}x} = \psi e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \left(\frac{iq}{\hbar c}\right) \vec{\nabla} x + e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \vec{\nabla} \psi$$

Subst. em VII:

$$\begin{aligned} (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \psi &= \left[ -i\hbar \left( \psi e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \left(\frac{iq}{\hbar c}\right) \vec{\nabla} x + e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \vec{\nabla} \psi \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{q}{c} \vec{A} e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \psi - \frac{q}{c} (\vec{\nabla} x) e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \psi \right] \\ &= e^{i\frac{q}{\hbar c}x} (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) \psi \quad \text{VII} \end{aligned}$$

□, □  
cancelam:

• Aplicando  $(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A})$  uma segunda vez:

$$(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) \left( (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \psi \right) = (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \left( (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) \psi \right)$$

$$= (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A} - \frac{q}{c}\vec{\nabla}x) e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \left\{ (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) \psi \right\}$$

$$= -i\hbar \left[ \vec{\nabla} e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \right] \left\{ (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) \psi \right\} + e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \vec{\nabla} \left\{ (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) \psi \right\} - \frac{q}{c} \vec{A} e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \left\{ (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) \psi \right\} - \frac{q}{c} \vec{\nabla} x e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \left\{ (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) \psi \right\}$$

$$= \left( -i\hbar \frac{iq}{\hbar c} \vec{\nabla} x \right) e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \left\{ (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) \psi \right\} + i\hbar e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \vec{\nabla} \left\{ (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) \psi \right\} - \frac{q}{c} \vec{A} e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \left\{ (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) \psi \right\} - \frac{q}{c} \vec{\nabla} x e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \left\{ (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) \psi \right\}$$

$$= e^{i\frac{q}{\hbar c}x} (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) \left\{ (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) \psi \right\} = e^{i\frac{q}{\hbar c}x} (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A})^2 \psi$$

$$\Rightarrow \left( (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}) \right)^2 e^{i\frac{q}{\hbar c}x} \psi = e^{i\frac{q}{\hbar c}x} (-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A})^2 \psi$$

Logo l.e. da eq de Schrödinger transformada (V) é igual ao l.e. de (IV), a menos do mesmo fator de fase que aparece no l.d.  $\Rightarrow$  é a mesma eq.

• A eq. VIII permite mostrar que

$\langle \Psi | \vec{\Pi} | \Psi \rangle = \langle \Psi | (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}) | \Psi \rangle$  é invariante por transf. de calibre, enquanto que  $\langle \Psi | \vec{p} | \Psi \rangle$  não é.

Resumindo:

- Mudanças de calibre mudam  $\phi$ ,  $\vec{A}$  e  $\Psi$ .
- $\Psi$  muda ganhando uma fase ~~global~~:  $\Psi(x) \rightarrow \Psi(x) e^{i \frac{e}{\hbar c} \chi(x,t)}$
- Momento canônico  $\vec{p}$  depende do calibre; Momento cinemático  $\vec{\Pi}$  é invariante.

• Vamos clarificar como muda o momento canônico  $\vec{p}$ . Vamos supor que

campos indep. de  $t$ :  $\phi \rightarrow \phi$   
 $\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla} \chi$  (depois da transf. de calibre)

• Contínuo operador  $G$  que leva  $|\alpha\rangle \rightarrow |\tilde{\alpha}\rangle$ :  $|\tilde{\alpha}\rangle = G|\alpha\rangle$

• Como  $\langle x \rangle$  não muda:  $G^\dagger \vec{x} G = \vec{x}$

• Como  $\vec{\Pi}$  é invariante:  $\langle \alpha | (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}) | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}) | \tilde{\alpha} \rangle$

$$\Rightarrow G^\dagger (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} - \frac{e}{c} \vec{\nabla} \chi) G = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$$

•  $G$  que satisfaz isso:  $G = \exp(i \frac{e}{\hbar c} \chi(\vec{x}))$

• Certo também que a norma seja preservada:  
 $\langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha} \rangle$

- é unitário  $\Rightarrow$  preserve norma.

-  $\vec{x}$  não muda pois  $G^\dagger \vec{x} G = \vec{x}$   $G G^\dagger = G^\dagger G = 1$ .  $[\vec{x}, G] = 0$

- como  $G$  transforma  $\vec{p}$ ?

$$g^{\dagger} \vec{p} g = \exp\left(-\frac{i e \vec{x}}{\hbar c} \chi\right) \vec{p} \exp\left(\frac{i e \vec{x}}{\hbar c} \chi\right) = \exp\left(-\frac{i e \vec{x}}{\hbar c} \chi\right) \left( \underbrace{\left[ \vec{p}, \exp\left(\frac{i e \vec{x}}{\hbar c} \chi\right) \right]}_{\substack{\text{---} \\ -i \hbar \vec{\nabla} \left( \exp\left(\frac{i e \vec{x}}{\hbar c} \chi\right) \right)}} + \exp\left(\frac{i e \vec{x}}{\hbar c} \chi\right) \vec{p} \right)$$

$$= -\exp\left(-\frac{i e \vec{x}}{\hbar c} \chi\right) i \hbar \vec{\nabla} \left( \exp\left(\frac{i e \vec{x}}{\hbar c} \chi\right) \right) + \vec{p}$$

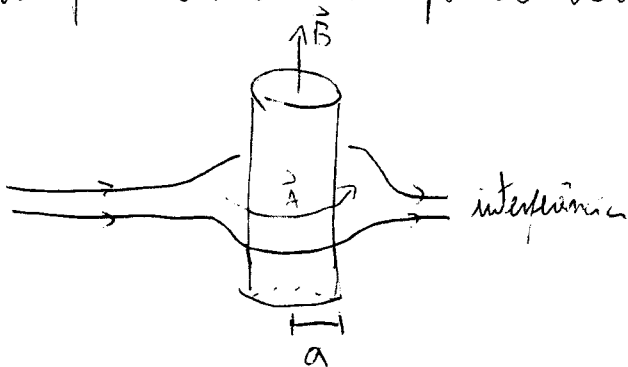
$$= (-i \hbar) \cdot \left( \frac{i e}{\hbar c} \right) \vec{\nabla} \chi + \vec{p} = \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{\nabla} \chi$$

$$\Rightarrow \boxed{g^{\dagger} \vec{p} g = \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{\nabla} \chi}$$

# Efeito Aharonov-Bohm (1959)

[Griffiths 10.2.3]

- Feixe de elétrons se divide, passando ao redor de solenoide
- Elétrons ~~passam~~ <sup>vão</sup> passam por regiões com  ~~$\vec{B}=0$~~   $\vec{B}=0$  (mas  $\vec{A} \neq 0$ )
- Últimos efeitos observável do potencial vetor  $\vec{A}$ .



$$\left. \begin{array}{l} r > a \text{ (fora do solenoide):} \\ \vec{B} = 0, \vec{E} = 0 \\ \vec{A} = \frac{\Phi}{2\pi r} \hat{\phi} \quad \Phi = \pi a^2 B \\ \quad \quad \quad \quad \quad = \text{fluxo magnético} \\ \text{(Usando a lei de Biot-Savart } \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \end{array} \right\}$$

- Qual o efeito de  $\vec{A}$  sobre funções de onda dos elétrons?

$$\left[ \frac{1}{2m} (-i\hbar \vec{\nabla} - q\vec{A})^2 + V \right] \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad \text{I} \quad \text{Se vamos resolver pl regiões com } \vec{B}=0, \vec{\nabla} \times \vec{A}=0$$

e podemos simplificar a eq. acima:  $\text{II } \Psi = e^{i\theta} \Psi'$ ,  $g(\vec{r}) = \frac{q}{\hbar} \int_0^{\vec{r}} A(\vec{r}') \cdot d\vec{r}'$

$$\Rightarrow \vec{\nabla} \Psi = e^{i\theta} (i\vec{\nabla} g) \Psi' + e^{i\theta} (\vec{\nabla} \Psi')$$

$$\Rightarrow (-i\hbar \vec{\nabla} - q\vec{A}) \Psi = -i\hbar e^{i\theta} \vec{\nabla} \Psi'$$

$$\Rightarrow (-i\hbar \vec{\nabla} - q\vec{A})^2 \Psi = -\hbar^2 e^{i\theta} \nabla^2 \Psi' \quad \text{Subst. em I:}$$

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi' + V \Psi' \right] = i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} \quad \text{III}$$

ou seja, pl achar solus de I, escreva  $\Psi$  como em II, e resolver a eq. de Schrödinger III sem potencial vetor. Depois acrescenta a fase  $e^{i\theta}$ , que dependerá do caminho escolhido.



- Ao passar ao redor do solenóide temos 2 caminhos diferentes. Cada sub-feixe ganhará uma fase diferente:

$$g = \frac{q}{h} \int \vec{A} \cdot d\vec{l} = \frac{q\Phi}{2\pi h} \int \left( \frac{1}{r} \hat{\phi} \right) (r \hat{\phi} dr) = \pm \frac{q\Phi}{2h}$$

⇒ Diferença de fase entre feixes =  $\frac{q\Phi}{h}$ ,  $\Phi$  = fluxo magnético dentro do solenóide.

↗ Medida experimentalmente em 1960.

- Partículas podem ter suas propriedades alteradas por campos que não são  $\neq 0$  somente em regiões onde elas nunca penetram ⇒ efeito AHARONOV-BOHM.