Evolução Temporal

- **6ºPostulado:**

  A evolução temporal do estado $|\psi(t)\rangle$ é governada pela equação de Schrödinger
  $$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle,$$
  onde $H(t)$ é a observável associada à energia total do sistema. Esse operador $H(t)$ é a Hamiltoniana do sistema.

  Regras de quantização

- Para construir um operador da mecânica quântica do tipo $A(\vec{R},\vec{P},t)$ a partir de quantidades físicas clássicas do tipo $\mathcal{A}(\vec{r},\vec{p},t)$, basta

$$\text{trocar}\begin{cases}\vec{r}(x,y,z) \text{ por } \vec{R}(X,Y,Z)\\ \vec{p}(p_x,p_y,p_z) \text{ por } \vec{P}(P_x,P_y,P_z)\end{cases} \quad \text{onde}\begin{cases}[R_i,R_j]=[P_i,P_j]=0\\ [R_i,P_j]=i\hbar\delta_{ij}\end{cases}$$

- As relações de comutação em coordenadas cartesianas são relativamente simples. Veremos que para outras coordenadas podem ser mais complicadas.
- Em algumas situações precisamos de regras adicionais. Por exemplo, suponha que $\mathcal{A}(\vec{r},\vec{p},t)=\vec{r}\cdot\vec{p}$. Na mecânica clássica, $\vec{r}\cdot\vec{p}=\vec{p}\cdot\vec{r}$. Isso não é verdade na mecânica quântica devido as regras de comutação acima. A consequência imediata é que $\vec{R}\cdot\vec{P}$ não é Hermiteano, pois $(\vec{R}\cdot\vec{P})^\dagger=\vec{P}\cdot\vec{R}$.

A solução para o problema é simetrizar: $\vec{r}\cdot\vec{p}\Rightarrow\frac{1}{2}(\vec{R}\cdot\vec{P}+\vec{P}\cdot\vec{R})$.

Exemplos importantes

- A Hamiltoniana de uma partícula em um potencial escalar

$$V(\vec{r}) = qU(\vec{r})$$

energia potencial potencial elétrico

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

- A Hamiltoniana clássica do sistema seria $\mathcal{H} = \dfrac{p^2}{2m} + V(\vec{r}),$ com $\vec{p} = m\dfrac{d\vec{r}}{dt} = m\vec{v}.$
- Segundo o que discutimos, a Hamiltoniana quântica fica $H = \dfrac{P^2}{2m} + V(\vec{R}).$
- E a equação de Schrödinger do sistema é: $i\hbar\dfrac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = [\dfrac{P^2}{2m} + V(\vec{R})]|\psi(t)\rangle.$

- A Hamiltoniana de uma partícula sujeita a um potencial vetor e a um potencial escalar dependentes do tempo.

Vimos na aula passada que $\begin{cases} \vec{p} = m\dot{\vec{r}} + q\vec{A}(\vec{r},t) \\ \mathcal{H}(\vec{r},\vec{p},t) = \frac{1}{2m}[\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r},t)]^2 + qU(\vec{r},t) \end{cases}$

- Segundo o que discutimos, a Hamiltoniana quântica fica

$$H(\vec{R},\vec{P},t) = \frac{1}{2m}[\vec{P} - q\vec{A}(\vec{R},t)]^2 + qU(\vec{R},t)$$

- Note que é o momento conjugado canônico $\vec{p}$, e não $m\vec{v}$, que vira $\vec{P}$.

A interpretação física dos postulados

No que diz respeito à observáveis e suas medidas

- Comecemos com a interpretação probabilística, via duas aplicações do Postulado 4 (caso de um espectro contínuo não-degenerado), que diz:
  Quando a quantidade física $\mathcal{A}$ é medida em um sistema que está em um estado normalizado $|\psi\rangle$, a probabilidade $d\mathcal{P}(\alpha)$ de obter um resultado entre α e $\alpha+d\alpha$ é igual a $d\mathcal{P}(\alpha)=\rho(\alpha)d\alpha=|\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2 d\alpha$, onde $|v_\alpha\rangle$ é um autovetor correspondendo ao autovalor α da observável A associada com $\mathcal{A}$.

  Como fica esse postulado para: $A = X$ e $A = P$?

  - Caso $A=X$. Comece pela equação de autovalor $X|x\rangle=x|x\rangle \begin{cases} x \rightarrow \text{autovalores} \\ |x\rangle \rightarrow \text{autovetores} \end{cases}$

    Conforme o postulado, $d\mathcal{P}(x) =|\langle x|\psi\rangle|^2 dx = |\psi(x)|^2 dx$ é a probabilidade de encontrar a partícula entre x e $x + dx$.

  - Caso $A=P$. Comece pela equação de autovalor $P|p\rangle=p|p\rangle \begin{cases} p \rightarrow \text{autovalores} \\ |p\rangle \rightarrow \text{autovetores} \end{cases}$

    Conforme o postulado, $d\mathcal{P}(p) =|\langle p|\psi\rangle|^2 dp = |\bar{\psi}(p)|^2 dp$ é a probabilidade de encontrar a partícula com momento entre p e $p + dp$.

A interpretação física dos postulados

No que diz respeito à observáveis e suas medidas

- Como interpretar a quantização dos autovalores (espectro discreto)?
  O postulado 3 diz:
  O único resultado possível da medida de uma quantidade física $\mathcal{A}$ é um dos autovalores da observável correspondente A.

○ Assim, para saber se o espectro é discreto ou contínuo, é preciso resolver a equação de autovalor: $A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$. Um caso comum de quantização está, por exemplo, no espectro de energia de uma partícula prisioneira de um potencial. Lembre que para prendê-la à um potencial, é preciso prender a onda associada a ela. Isso impõe a condição de contorno $\lim_{r\to\infty} \psi(r) = 0$ e só algumas energias conseguem satisfazê-la, juntamente com as condições de continuidade da função e de sua derivada nos pontos de retorno clássico.

○ Ainda nesse semestre, estudaremos o espectro do átomo de hidrogênio e veremos que possui espectro discreto (elétron ligado ao próton) com um número infinito de níveis e espectro contínuo, acima da chamada energia de ionização, onde o elétron "escapa" do próton com um contínuo de velocidades (energias) possíveis.

A interpretação física dos postulados

No que diz respeito à observáveis e suas medidas

- Como interpretar o processo de medida? O que significa o chamado colapso do estado, fruto da realização de uma medida?
  - Essa discussão é motivada pelo postulado 5, que diz *Se a medida de uma quantidade física $\mathcal{A}$ sobre o sistema em um estado $|\psi\rangle$ dá o resultado a_n, o estado do sistema imediatamente após a medida é a projeção normalizada, $\dfrac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}$, de $|\psi\rangle$ sobre o subespaço associado com a_n.*
  - Assim, o processo de medida poderia ser simbolizado por $(\epsilon \to 0)$:

$$|\psi(0)\rangle \xmapsto{H} \underbrace{|\psi(t_0-\epsilon)\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle \overset{(a_n)}{\Longrightarrow} |\psi'(t_0+\epsilon)\rangle = \frac{1}{C}\sum_{i=1}^{g_n} c_n^i|u_n^i\rangle}_{\text{em } t_0 \text{ medimos a observável } A \text{ e encontramos } a_n} \xmapsto{H} |\psi'(t)\rangle$$

Lembre que $A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle$ e que nesse caso $P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i|$ e $C = \sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2}$.

  - Essa mudança abrupta em t_0 que leva o estado de $|\psi(t_0-\epsilon)\rangle$ para $|\psi'(t_0+\epsilon)\rangle$ é o colapso devido a medida de $\mathcal{A}$. A perturbação decorrente da medida é dita fundamental (independente do aparato), embora a interação do aparato com o sistema seja essencial para o processo de observação.

Valor médio de uma observável em um dado estado

- O postulado 4, nas suas diversas versões, pode ser resumido da seguinte forma:

a chance de obter um dado autovalor é $\begin{cases} \text{discreto} \rightarrow \mathcal{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2 \\ \text{contínuo} \rightarrow d\mathcal{P}(\alpha) = |\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2 d\alpha \end{cases}$

- Como verificá-lo? Que tal, realizar N experimentos idênticos (todos com o sistema em um mesmo estado quântico) e perguntar: se N for suficientemente grande (situação que a estatística funciona), o que deveríamos esperar? Que tal,

$$\mathcal{P}(\text{probabilidade experimental}) = \mathcal{P}(\text{probabilidade teórica})$$

- Calcular o valor médio dos valores experimentais obtidos é fácil: some todos e divida pelo número de experimentos. E teoricamente? Vamos mostrar que vale

$$\langle A\rangle_\psi = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

Para tanto, suponha que o espectro de A seja discreto e para cada N medidas $\mathcal{N}(a_n)$ dão a_n. Isso induz que $\displaystyle\lim_{N\to\infty}\frac{\mathcal{N}(a_n)}{N} = \mathcal{P}(a_n)$, onde $\displaystyle\sum_n \mathcal{N}(a_n) = N$.

- Quanto vale o valor médio? Não seria a média ponderada $\langle A\rangle_\psi = \dfrac{\sum_n a_n\mathcal{N}(a_n)}{N}$?

No limite de validade estatística fica

$$\langle A\rangle_\psi = \lim_{N\to\infty}\frac{\sum_n a_n\mathcal{N}(a_n)}{N} = \sum_n a_n \lim_{N\to\infty}\frac{\mathcal{N}(a_n)}{N} = \sum_n a_n\mathcal{P}(a_n).$$

Valor médio de uma observável em um dado estado

- Quanto vale o valor médio (continuação)?

$$\langle A\rangle_\psi = \sum_n a_n \mathcal{P}(a_n) = \sum_n a_n \Big(\sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2\Big) = \sum_n a_n \Big(\sum_{i=1}^{g_n} \langle\psi|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi\rangle\Big) =$$

$$= \sum_n \Big(\sum_{i=1}^{g_n} \langle\psi|a_n|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi\rangle\Big) = \sum_n \Big(\sum_{i=1}^{g_n} \langle\psi|A|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi\rangle\Big) =$$

$$= \langle\psi|A\Big(\sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i|\Big)|\psi\rangle = \langle\psi|A\mathbb{1}|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle \qquad \text{c.q.d.}$$

- Quanto vale o valor médio se o espectro for contínuo?

Para tanto, suponha que o espectro de A seja contínuo e para cada N medidas $d\mathcal{N}(\alpha)$ dão resultados entre α e $\alpha + d\alpha$. De forma semelhante ao discreto, isso induz que $\displaystyle\lim_{N\to\infty} \frac{d\mathcal{N}(\alpha)}{N} = d\mathcal{P}(\alpha)$. Quanto vale o valor médio agora?

Não seria a média ponderada $\langle A\rangle_\psi = \dfrac{\int \alpha d\mathcal{N}(\alpha)}{N}$? No limite de validade estatística fica $\displaystyle\langle A\rangle_\psi = \lim_{N\to\infty} \frac{\int \alpha d\mathcal{N}(\alpha)}{N} = \int \alpha \lim_{N\to\infty} \frac{d\mathcal{N}(\alpha)}{N} = \int \alpha\, d\mathcal{P}(\alpha)$.

mas $d\mathcal{P}(\alpha) = |\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2 d\alpha \Rightarrow \therefore\ \langle A\rangle_\psi = \displaystyle\int \alpha\, |\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2 d\alpha$

Valor médio de uma observável em um dado estado

- Quanto vale o valor médio se o espectro for contínuo (continuação)?

$$\langle A\rangle_\psi = \int \alpha \; |\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2 d\alpha = \int \alpha \; \langle\psi|v_\alpha\rangle\langle v_\alpha|\psi\rangle = \int \langle\psi|\alpha|v_\alpha\rangle\langle v_\alpha|\psi\rangle = \int \langle\psi|A|v_\alpha\rangle\langle v_\alpha|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi|A\Big(\int d\alpha|v_\alpha\rangle\langle v_\alpha|\Big)|\psi\rangle = \langle\psi|A\mathbb{1}|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle \qquad \text{c.q.d.}$$

Comentários:

(1) Fizemos média em medidas e não média no tempo.

(2) Se $|\psi\rangle$ não estiver normalizada, isto é se $\langle\psi|\psi\rangle \neq 1$, use $\langle A\rangle_\psi = \dfrac{\langle\psi|A|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$.

(3) Na prática, para calcular o valor médio, escolha uma representação

$$\langle X\rangle_\psi = \langle\psi|X|\psi\rangle = \int d^3r \; \langle\psi|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|X|\psi\rangle = \int d^3r \; \langle\psi|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|x|\psi\rangle = \int d^3r \; \psi^\star(\vec{r})x\psi(\vec{r})$$

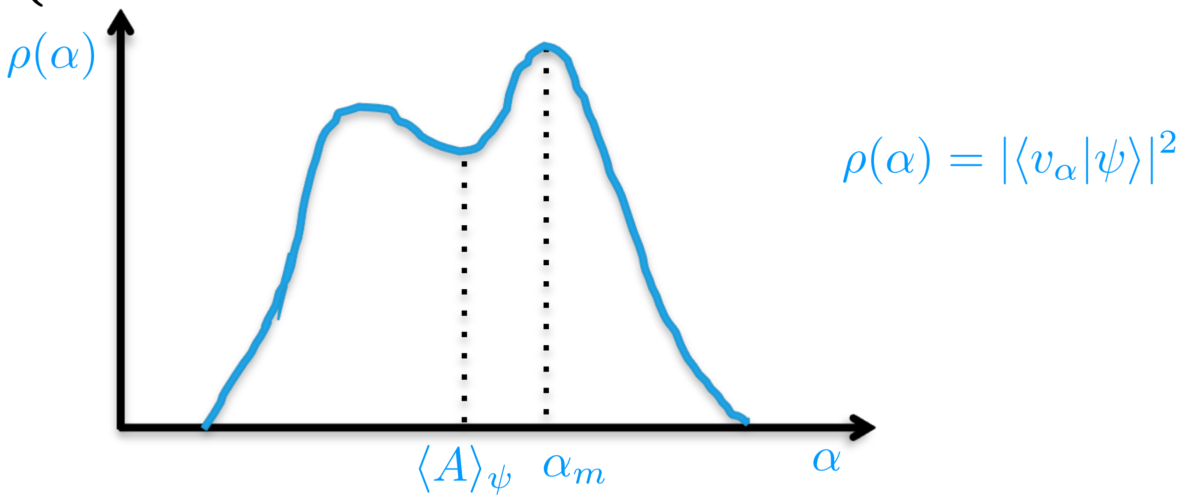
$$\langle P_x\rangle_\psi = \langle\psi|P_x|\psi\rangle = \int d^3p \, \langle\psi|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|P_x|\psi\rangle = \int d^3p \, \langle\psi|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|p_x|\psi\rangle = \int d^3p \, \bar{\psi}^\star(\vec{p})p_x\bar{\psi}(\vec{p})$$

$$\langle P_x\rangle_\psi = \langle\psi|P_x|\psi\rangle = \int d^3r \, \langle\psi|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|P_x|\psi\rangle = \int d^3r \, \langle\psi|\vec{r}\rangle\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\langle\vec{r}|\psi\rangle$$ ou seja, ao

escolher a representação das coordenadas, $\langle P_x\rangle_\psi = \displaystyle\int d^3r \; \psi^\star(\vec{r})\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(\vec{r})$.

Desvio quadrático da média

$\langle A\rangle_\psi = \langle\psi|A|\psi\rangle \equiv$ valor médio da observável A não contém nenhuma informação sobre a dispersão $\begin{cases} \text{fina} \to \text{muitos valores ao redor de } \langle A\rangle_\psi \\ \text{larga} \to \text{valores distribuídos} \end{cases}$



Os valores $\langle A\rangle_\psi$ (valor médio) e α_m (valor de α que corresponde ao máximo) podem não coincidir. De fato, podemos construir distribuições com formatos bastante distintos e arbitrários. Uma boa pergunta seria, como escrever uma quantidade que caracterize a dispersão ao redor de $\langle A\rangle_\psi$?

- Que tal a média de $A - \langle A\rangle$, isto é $\langle A - \langle A\rangle\rangle$? o problema é que isso dá: $\langle\psi|A|\psi\rangle - \langle\psi|\langle\psi|A|\psi\rangle|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle - \langle\psi|A|\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle - \langle\psi|A|\psi\rangle = 0$
- Que tal a média de $(A - \langle A\rangle)^2 = \langle\psi|(A - \langle A\rangle)^2|\psi\rangle$? Agora as contribuições do lado esquerdo de $\langle A\rangle$ não cancelam com as do lado direito.

Desvio quadrático da média

- A quantidade $\triangle A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}$ é chamada de desvio quadrático da média. Note que $(\triangle A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle$ pode ser escrito por $\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle (A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle^2 + \langle A \rangle^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$ e $\therefore$

$$\boxed{(\triangle A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \Longrightarrow \triangle A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}}$$

- Suponha $\begin{cases} A|v_\alpha\rangle = \alpha|v_\alpha\rangle \\ \rho(\alpha) = |\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2 \\ \int d\alpha \; |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha| = \mathbb{1} \end{cases}$

$$(\triangle A)^2 = \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 \Big(\int d\alpha \; |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha| \Big) |\psi\rangle \text{ ou ainda}$$

$$(\triangle A)^2 = \int d\alpha \; \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 \big(|v_\alpha\rangle\langle v_\alpha| \big) |\psi\rangle = \int d\alpha \; (\alpha - \langle A \rangle)^2 \langle \psi | v_\alpha \rangle \langle v_\alpha | \psi \rangle$$

$$(\triangle A)^2 = \int d\alpha \; (\alpha - \langle A \rangle)^2 \rho(\alpha) \text{ ou usando a caixa azul}$$

$$(\triangle A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = \int d\alpha \; \alpha^2 \rho(\alpha) - \Big[\int d\alpha \; \alpha \rho(\alpha) \Big]^2$$

A relação de incerteza e o desvio quadrático da média

- Considere a quantidade $|\varphi\rangle = (Q + i\lambda P)|\psi\rangle$, onde Q e P respeitam a relação de comutação $[Q, P] = i\hbar$.
  - Como $\langle\varphi|\varphi\rangle$ é sempre positivo (é o quadrado da norma), podemos escrever:
    $\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle\psi|(Q - i\lambda P)(Q + i\lambda P)|\psi\rangle = \langle\psi|Q^2|\psi\rangle + \langle\psi|i\lambda QP - i\lambda PQ|\psi\rangle + \langle\psi|\lambda^2 P^2|\psi\rangle$,
    ou ainda, $\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle Q^2\rangle + i\lambda\langle QP - PQ\rangle + \lambda^2\langle P^2\rangle = \langle Q^2\rangle - \lambda\hbar + \lambda^2\langle P^2\rangle \geq 0$
  - Para que esse polinômio de 2o. grau em λ seja sempre positivo ou nulo, para qualquer que seja λ é preciso exigir que seu discriminante seja nulo ou negativo, isto é, $\Delta = b^2 - 4ac = \hbar^2 - 4\langle P^2\rangle\langle Q^2\rangle \leq 0 \Rightarrow \langle P^2\rangle\langle Q^2\rangle \geq \dfrac{\hbar^2}{4}$.
  - Para obter isso em termos de desvios quadráticos da média,
    defina $\begin{cases} P' = P - \langle P\rangle \\ Q' = Q - \langle Q\rangle \end{cases}$ e siga o procedimento acima para obter $\langle P'^2\rangle\langle Q'^2\rangle \geq \dfrac{\hbar^2}{4}$,
    onde usamos que $[Q', P'] = i\hbar$ (lembre $\langle P\rangle$ e $\langle Q\rangle$ são números).
  - Lembre da definição de desvio quadrático da média e note que $\begin{cases} \langle P'^2\rangle = (\Delta P)^2 \\ \langle Q'^2\rangle = (\Delta Q)^2 \end{cases}$
    e $\therefore$ $\Delta P \Delta Q \geq \dfrac{\hbar}{2}$, essa é a famosa relação de incerteza (momento e posição).
  - É possível mostrar que a forma mais geral é $\Delta A \Delta B \geq \dfrac{1}{2}\left|\langle [A, B]\rangle\right|$

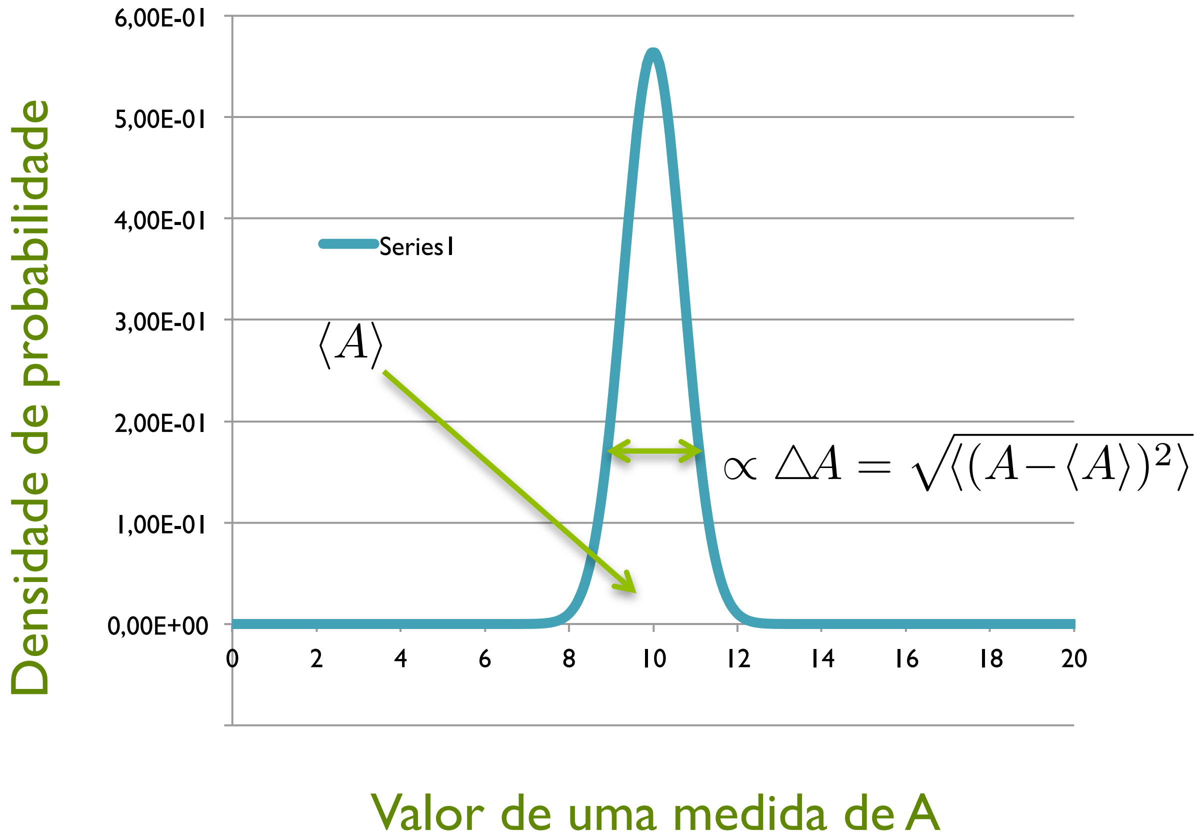
F689
Aula 13

Relação de Incerteza: forma geral

$$\boxed{\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2, \text{ onde } A \text{ e } B \text{ são observáveis}}$$

Se $[A,B] \neq 0$ *e o lado direito for estritamente positivo, temos que se* $\langle(\Delta A)^2\rangle$ *diminuir,* $\langle(\Delta B)^2\rangle$ *precisa aumentar e se* $\langle(\Delta B)^2\rangle$ *diminuir,* $\langle(\Delta A)^2\rangle$ *precisa aumentar para garantir um valor mínimo do produto que supere o lado direito.*

Se $[A,B] = 0$ *não há restrições relevantes.*

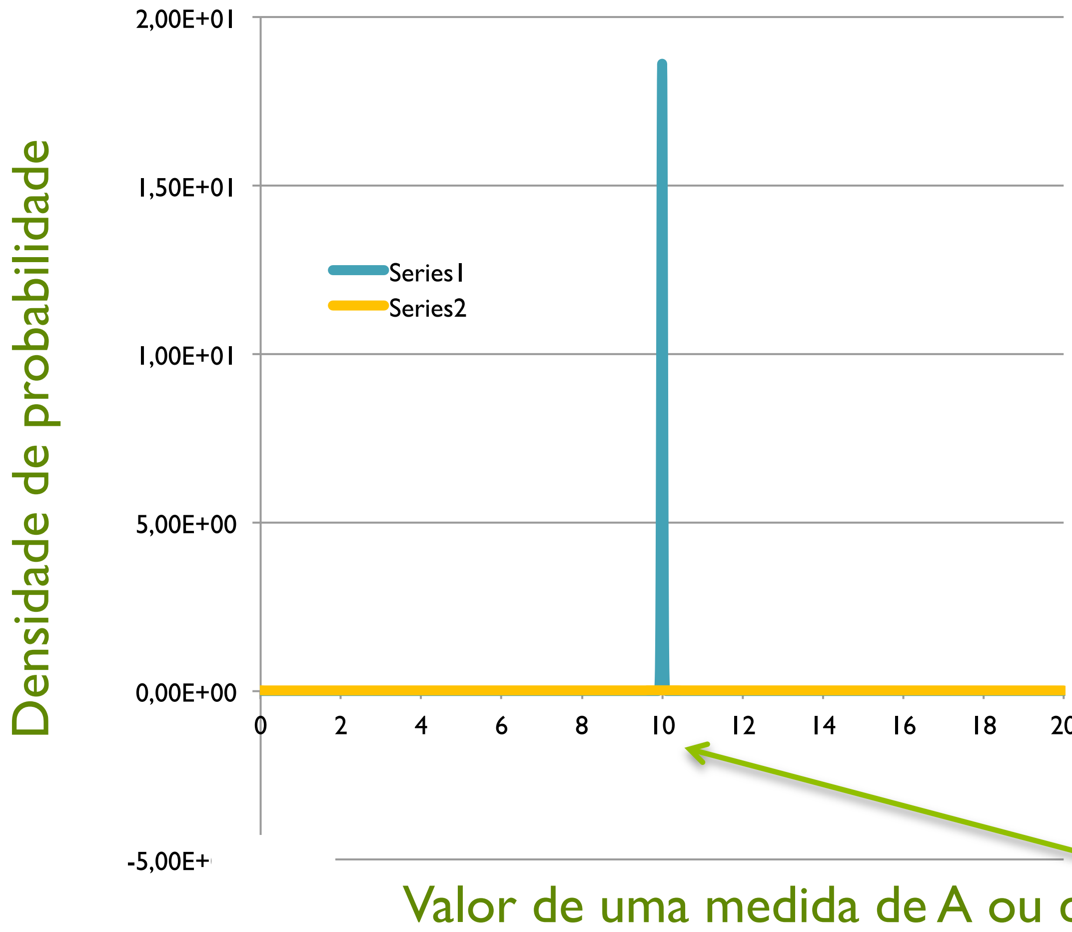


MAPLima

Relação de Incerteza: forma geral

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2, \text{ suponha } [A,B]\neq 0$$

A chamada relação de incerteza é só um caso particular da expressão acima



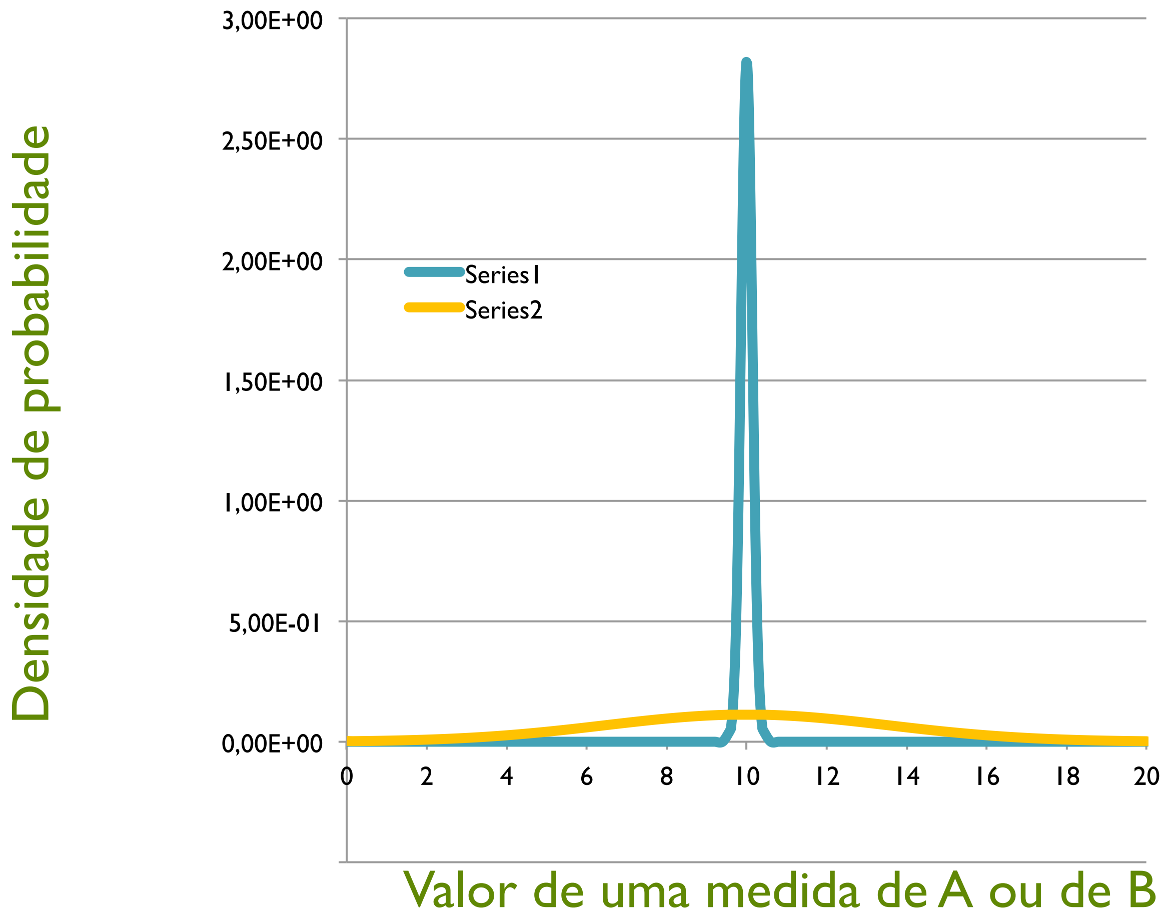
(só para facilitar)

$$\langle A\rangle = \langle B\rangle$$

Relação de Incerteza: forma geral

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2, \text{ suponha } [A,B]\neq 0$$

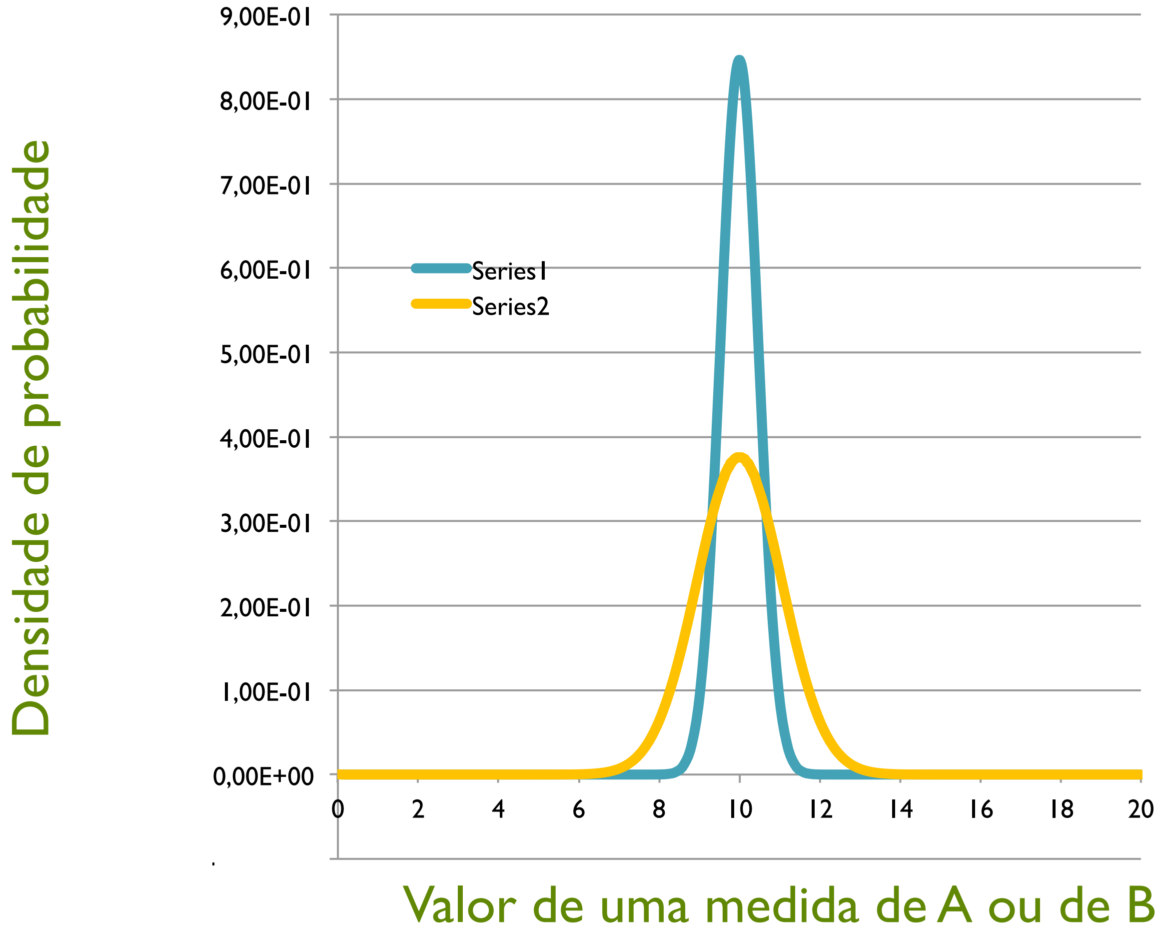
A chamada relação de incerteza é só um caso particular da expressão acima



Relação de Incerteza: forma geral

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2, \text{ suponha } [A,B] \neq 0$$

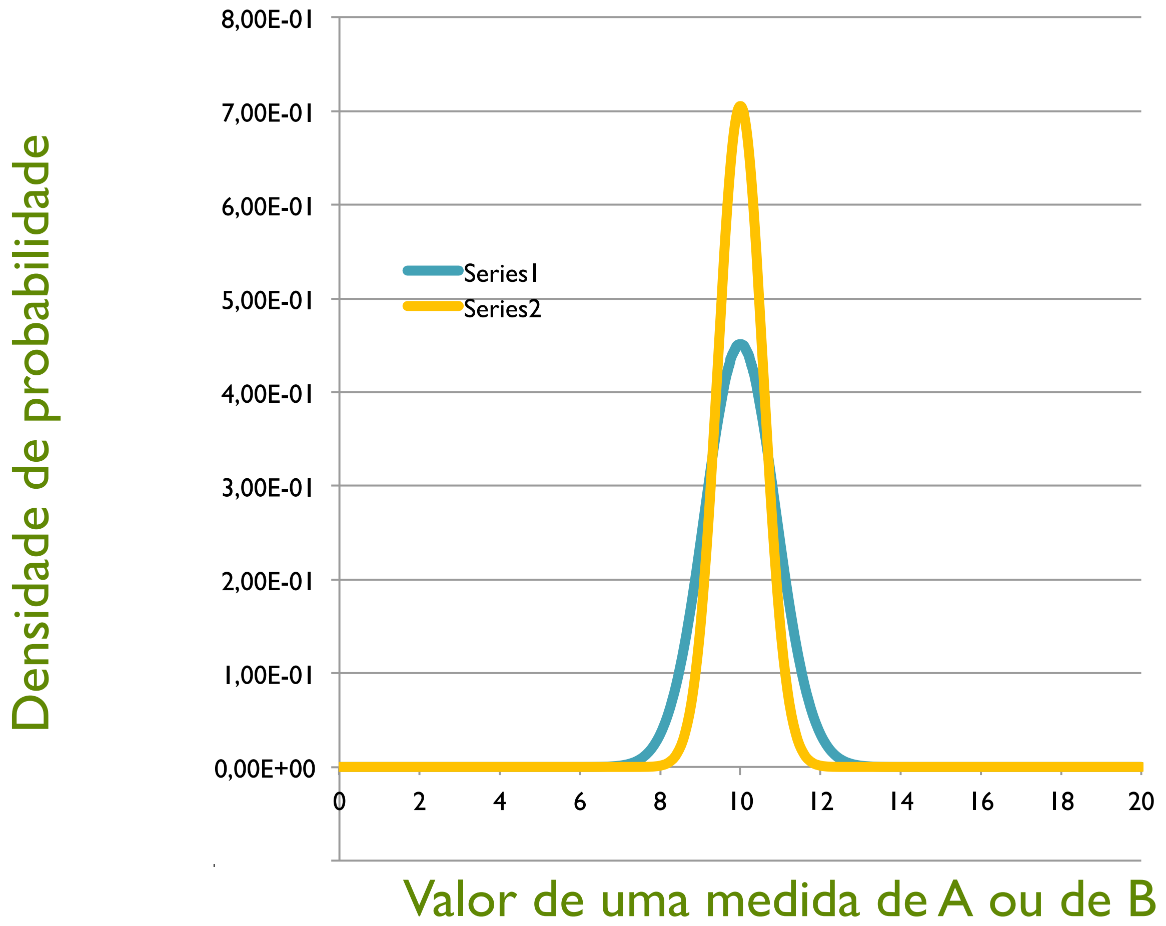
A chamada relação de incerteza é só um caso particular da expressão acima



Relação de Incerteza: forma geral

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2, \text{ suponha } [A,B]\neq 0$$

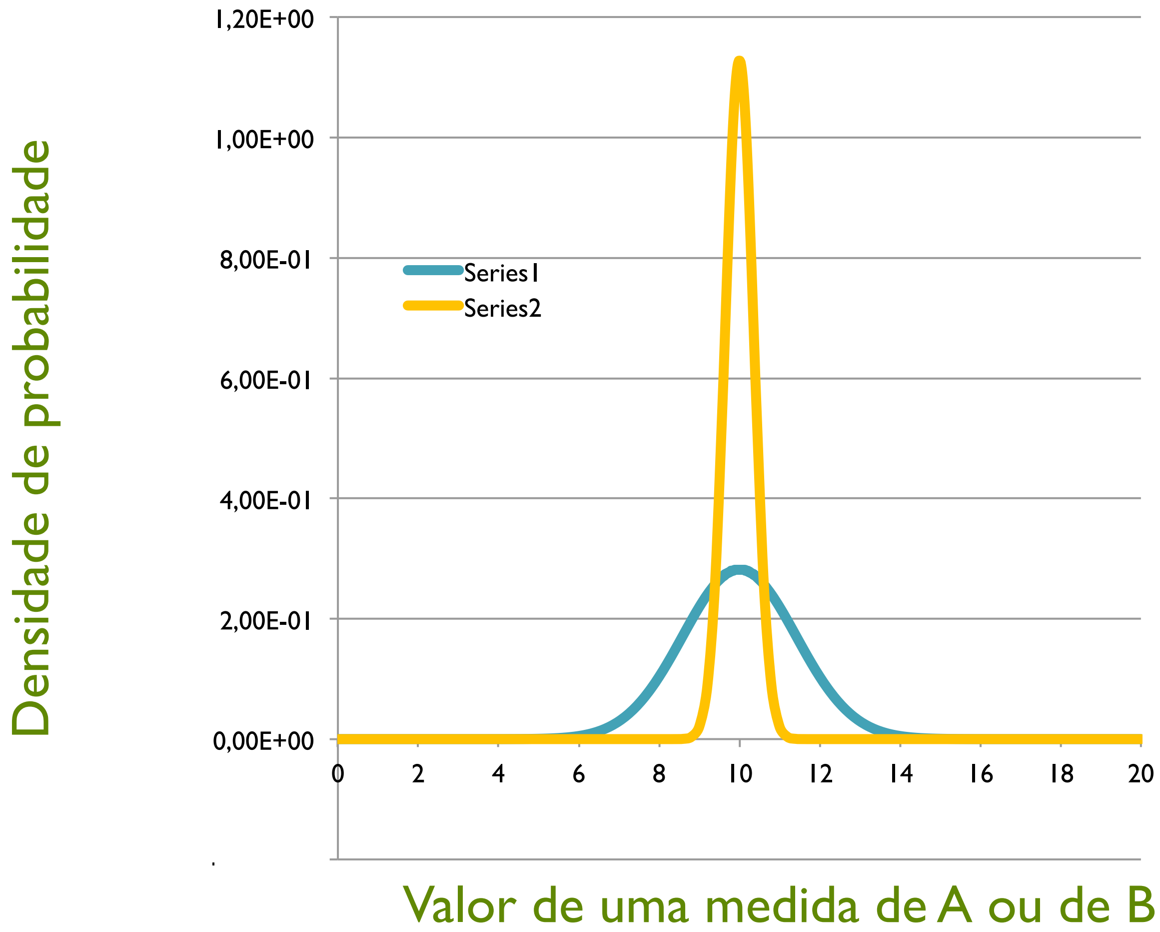
A chamada relação de incerteza é só um caso particular da expressão acima



Relação de Incerteza: forma geral

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2, \text{ suponha } [A,B]\neq 0$$

A chamada relação de incerteza é só um caso particular da expressão acima



Relação de Incerteza: forma geral

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2, \text{ suponha } [A,B]\neq 0$$

A chamada relação de incerteza é só um caso particular da expressão acima