

Dualidade partícula/onda da luz: Uma boa inspiração para a Mecânica Quântica

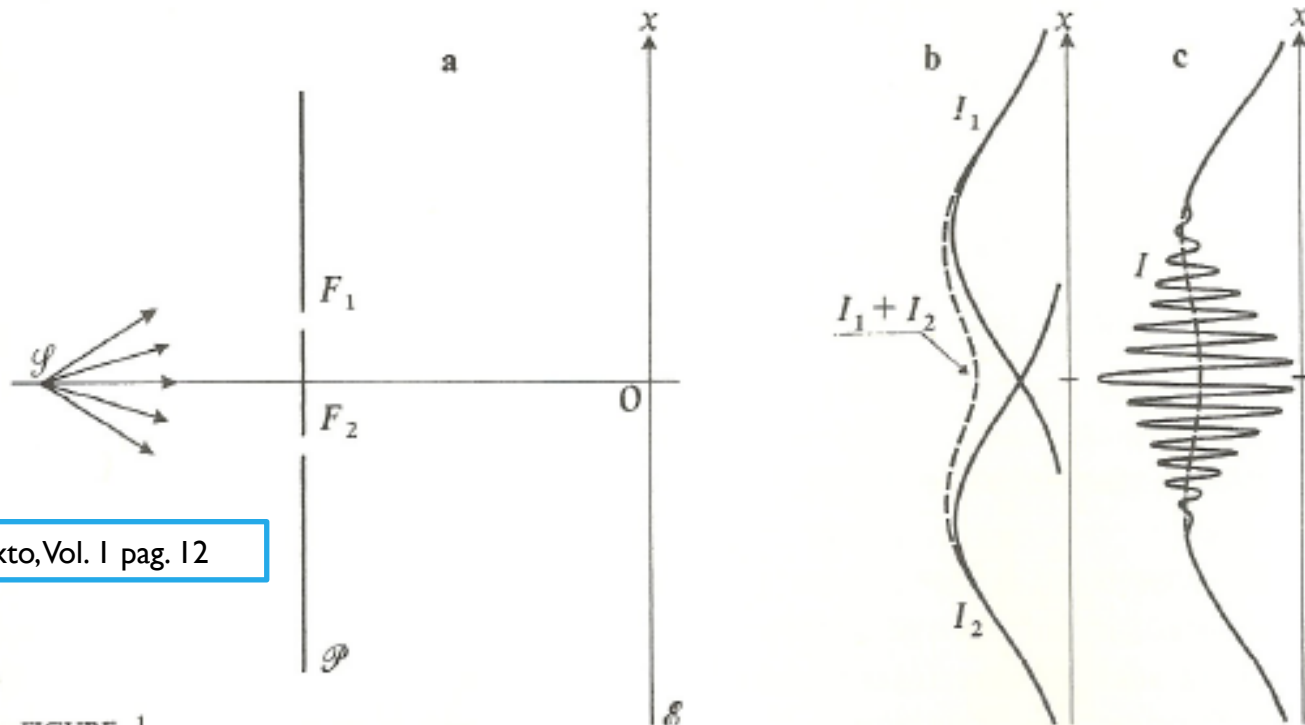


Figura do livro texto, Vol. I pag. 12

FIGURE 1

Diagrama do experimento de interferência de dupla fenda de Young (fig. a). Cada uma das fendas F_1 e F_2 produz um padrão de difração na tela ϵ . As intensidades correspondentes são $I_1(x)$ e $I_2(x)$ (linhas sólidas da figura b). Quando as duas fendas são abertas simultaneamente, a intensidade $I(x)$ observada na tela não é a soma $I_1(x) + I_2(x)$ (linha tracejada nas figuras b e c), mas mostram oscilações devido à interferência entre os campos elétricos por F_1 e F_2 (curva figura c).

Descrição do experimento de dupla fenda de Young

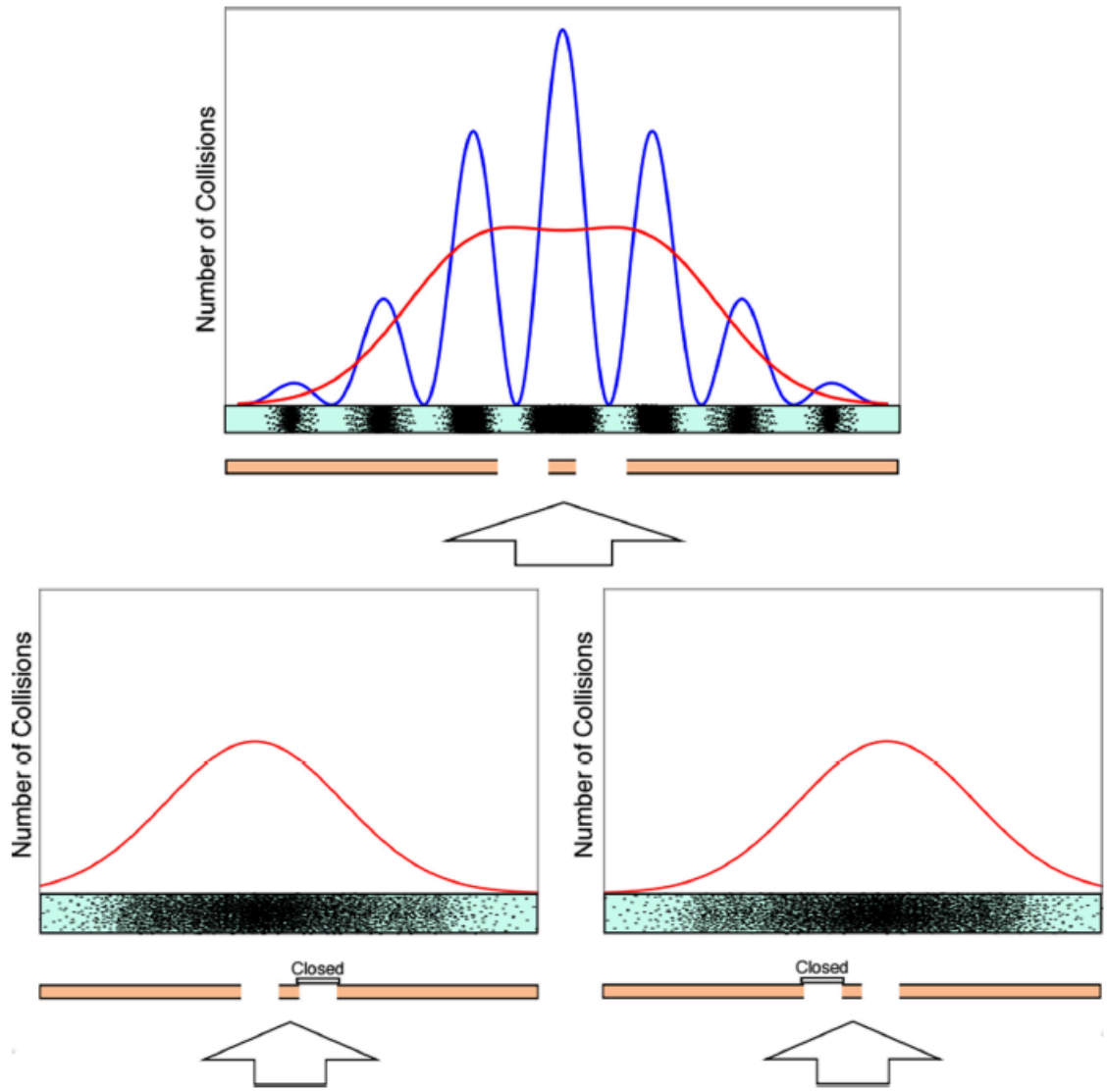
- Coloque um filme fotográfico no anteparo, aguarde tempo suficiente e as franjas de interferência aparecerão. Como foi um fóton por vez, temos que descartar a hipótese de que elas são devido à interferência entre fótons.
- Diminua a intensidade e revele o filme em intervalos curtos de tempo. Cada fóton produz uma marca localizada no anteparo e não uma franja de interferência. Descarte a hipótese pura ondulatória.

Quando muitos fótons acertam o anteparo, o seguinte acontece:

- Cada um faz uma marca localizada.
- O grande número de marcas mostra a figura de interferência (regiões escuras e claras).

Coube uma pergunta: dentro do contexto corpuscular, porque o fenômeno muda drasticamente dependendo se só uma ou ambas as fendas estão abertas?

Para melhor entender o problema, notamos que não é possível determinar por onde o fóton passou na experiência sem destruir a curva de interferência.



★ **Quantum “Ghosts”**, Gabriela M. Amaral, David Q. Aruquipa, Ludwing F. M. Camacho, Luiz F. C. Faria, Sofía I. C. Guzmán, Damaris T. Maimone, Melissa Mendes, and Marco A. P. Lima, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. **38**, n^o 3, e3309 (2016).

Partículas e Ondas de Matéria

1. Relações de de Broglie.

- Espectros de emissão e absorção de átomos é composto por “linhas finas”.
 - Energias possíveis do átomo E_i , com $i = 1, 2, 3 \dots n \dots k$ com n discreto e k contínuo. A surpresa estava no espectro discreto.
 - Energias de fótons causando transições $h\nu_{ij} = |E_i - E_j|$ discretas e contínuas. A parte contínua é devido a foto-ionização do átomo.
- **1914** - A experiência de Franck-Hertz demonstrou isso (átomo de mercúrio).
 - Bohr and Sommerfeld → Primeiras explicações:

| | |
|---|-----------------------|
| { | órbitas especiais |
| | e |
| } | regras de quantização |
- **1923** - de Broglie: “*Partículas materiais, assim como fótons, tem aspectos ondulatórios*”.
 - Ver complemento A_I

$$\left\{ \begin{array}{l} E = h\nu = \hbar\omega \\ \vec{p} = \hbar\vec{k} \\ \lambda = \frac{2\pi}{|\vec{k}|} = \frac{h}{|\vec{p}|} \end{array} \right.$$
- **1927** - Davisson and Germer confirmam o caráter ondulatório das partículas com a experiência de difração e interferência de elétrons.

Funções de Onda – Equação de Schrödinger

2. A versão de Schrödinger da Mecânica Quântica (um resumo da disciplina F589).

- O estado é caracterizado por $\Psi(\vec{r}, t)$ que contém toda a informação possível de se obter sobre a partícula.

- No mundo quântico {
 - Perde-se o conceito de trajetória, conhecimento da posição e velocidade da partícula a cada instante.
 - Ganha-se o conceito de estado quântico, dependente do tempo, e conhecimento do futuro baseado em probabilidades.

- $\Psi(\vec{r}, t)$ é interpretada como sendo uma amplitude de probabilidade da presença da partícula, pois permite definir:

$$dP(\vec{r}, t) \equiv C |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r,$$

onde C é uma constante de normalização, e considerar

$$dP(\vec{r}, t) \text{ como sendo } \begin{cases} \text{a probabilidade da partícula estar, no} \\ \text{instante } t, \text{ em um elemento de volume} \\ d^3r = dx dy dz, \text{ centrado em } \vec{r}. \end{cases}$$

A presença do volume d^3r permite concluir que:

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 \text{ é uma densidade de probabilidade.}$$

A velocidade de grupo segundo a condição estacionária

- Para aplicar a condição estacionária no pacote, tome

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) e^{i(kx - \omega t)} dk \text{ e escreva } g(k) \text{ na forma}$$

$$g(k) = |g(k)| e^{i\alpha(k)} \Rightarrow \text{isso vale para } \forall \text{ número complexo.}$$

Isso permite re-escrever o pacote na forma:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int |g(k)| e^{i(\alpha(k) + kx - \omega t)} dk$$

- A condição estacionária é obtida fazendo a primeira derivada da fase (argumento complexo da exponencial) com respeito à k igual à zero em k_0 , centro de $|g(k)|$. Conforme já argumentamos, isso equivale a pedir que a primeira contribuição diferente de zero seja quadrática em $k - k_0$, o que faz ela contribuir com o mesmo sinal antes e depois de k_0 .
- Assim, a condição estacionária é $\frac{d}{dk} (\alpha(k) + kx - \omega t)|_{k=k_0} = 0$ e isso implica em: $\frac{d}{dk} \alpha(k)|_{k=k_0} + x_m - \left(\frac{d}{dk} \omega(k)|_{k=k_0} \right) t = 0 \Rightarrow$ solução clássica de um ponto

$$x_m \text{ que realiza movimento uniforme na direção } x, \text{ com } \begin{cases} x_m(0) = -\frac{d\alpha}{dk}|_{k=k_0} \\ v_g = \frac{d\omega}{dk}|_{k=k_0}. \end{cases}$$

$x_m(t)$ é o centro do pacote que viaja com velocidade de grupo v_g

Relação de Incerteza de Heisenberg

- Em F689, obtivemos que se $\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \bar{\Psi}(p) e^{i\frac{px}{\hbar}} dp$, existe uma relação entre a largura de $|\Psi(x, 0)|$ e a largura de $|\bar{\Psi}(p)|$.

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar/2, \text{ com } \int |\Psi(x, 0)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\bar{\Psi}(p)|^2 dp = 1$$

- Essa propriedade, válida para ondas em geral, ficou surpreendente por envolver partículas materiais e ficou conhecida por *Princípio* ou *Relação de incerteza de Heisenberg*. Na prática significa:

É impossível prever o resultado da medida da posição e do momento linear de uma partícula, com precisão arbitrária.

- Para sistemas clássicos, onde $\frac{\hbar}{m}$ pode ser considerado desprezível,

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar \rightarrow \Delta v \Delta x \geq \frac{\hbar}{m} \Rightarrow \Delta v \Delta x \geq 0,$$

as trajetórias (conhecimento de v e $x, \forall t$) podem ser previstas.

Resumindo (Formalismo matemático de Schrödinger)

Propriedade

Base discreta

Base contínua

Ortonormalização $(u_i, u_j) = \int d^3r u_i^*(\vec{r})u_j(\vec{r}) = \delta_{ij}$ $(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$

Relação de completeza $\sum_i u_i(\vec{r})u_i^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$ $\int d\alpha w_\alpha(\vec{r})w_\alpha^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$

Expansão da função de onda $\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$ $\psi(\vec{r}) = \int d\alpha c(\alpha)w_\alpha(\vec{r})$

As componentes de $\psi(\vec{r})$ $c_i = (u_i, \psi)$ $c(\alpha) = (w_\alpha, \psi)$

Produto escalar $(\varphi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i$ $(\varphi, \psi) = \int d\alpha b^*(\alpha)c(\alpha)$

Quadrado da Norma $(\psi, \psi) = \sum_i |c_i|^2$ $(\psi, \psi) = \int d\alpha |c(\alpha)|^2.$

- Note que a mesma função de onda pode ser representada por diferentes bases.
- Note, em especial, que as componentes em bases diferentes são diferentes, mas representam “pedaços” da mesma coisa.
- Isso inspirou Dirac a criar um novo formalismo!

Resumo da notação de Dirac

Definimos:

- kets: $|\psi\rangle \rightarrow$ vetor estado.
- bras: $\langle\varphi| \rightarrow$ funcional linear.
- bracket: $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^* \rightarrow$ produto escalar.
- Operador: $A \rightarrow A|\psi\rangle = |\psi'\rangle$.
- Elemento de matriz: $\langle\varphi|A|\psi\rangle \rightarrow \langle\varphi|(A|\psi\rangle)$.
- Operador sobre um bra: $\langle\varphi|A$ também é um bra, definido por $(\langle\varphi|A)|\psi\rangle = \langle\varphi|(A|\psi\rangle) = \langle\varphi|A|\psi\rangle$.
- O bra associado ao ket $A|\psi\rangle$ é definido por $\langle\psi|A^\dagger$. O operador A^\dagger é dito o adjunto de $A \implies A|\psi\rangle = |A\psi\rangle \leftrightarrow \langle\psi|A^\dagger = \langle A\psi|$.
- Vale a relação $\langle\varphi|A^\dagger|\psi\rangle = \langle A\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|A\varphi\rangle^* = \langle\psi|A|\varphi\rangle^*$.
- Se $A^\dagger = A \rightarrow A$ é Hermiteano. Neste caso $\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\psi|A|\varphi\rangle^*$.

Em F689, introduzimos o conceito de representação de um estado físico qualquer em um espaço de estados conhecidos (uma base conhecida).

Representações no espaço de estados

- A representação de kets.

Considere uma base conhecida $\{|u_i\rangle\}$. Vimos que um ket de sua escolha arbitrária poderia ser escrito com a ajuda do operador unidade por:

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \Rightarrow \begin{cases} \text{O conjunto de números} \\ \text{complexos } c_i \text{ descreve o ket.} \end{cases}$$

Representaremos o ket nessa base por uma matriz coluna, dada por:

$$|\psi\rangle \doteq \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle u_i|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \text{ se base contínua } |\psi\rangle \doteq \begin{pmatrix} \vdots \\ c(\alpha) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots \\ \langle w_\alpha|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Note que os números mudariam de acordo com a escolha da base. Em F689, aprendemos como mudar de uma base para outra. Faremos um caso hoje.

Representações no espaço de estados

- **A representação de bras.**

Considere uma base conhecida $\{|u_i\rangle\}$. Vimos que um bra de sua escolha arbitrária poderia ser escrito com a ajuda do operador unidade por:

$$\langle\psi| = \langle\psi|\mathbb{1} = \sum_i \langle\psi|u_i\rangle\langle u_i| = \sum_i c_i^* \langle u_i| \Rightarrow \begin{cases} \text{O conjunto de números} \\ \text{complexos } c_i^* \text{ descreve o bra.} \end{cases}$$

Representaremos o bra nessa base por uma matriz linha, dada por:

$$\langle\psi| \doteq (c_1^* \ c_2^* \ \dots \ c_i^* \ \dots) = (\langle\psi|u_1\rangle \ \langle\psi|u_2\rangle \ \dots \ \langle\psi|u_i\rangle \ \dots) .$$

Se base for contínua

$$\langle\psi| \doteq (\dots \ c^*(\alpha) \ \dots) = (\dots \ \langle\psi|w_\alpha\rangle \ \dots)$$

Note que os números que representam os bras são os complexos conjugados dos números que representam os kets. A representação do bra nada mais é que a transposta da matriz que representa o ket, seguida da conjugação complexa de todos os elementos.

Como obter o bracket $\langle\varphi|\psi\rangle$ nesta representação?

Representações no espaço de estados

- **O bracket** $\langle \varphi | \psi \rangle$

Considere novamente uma base conhecida $\{|u_i\rangle\}$. Para obter o valor do bracket nesta base basta fazer uso do operador unidade na relação:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | \mathbb{1} | \psi \rangle = \sum_i \langle \varphi | u_i \rangle \langle u_i | \psi \rangle = \sum_i b_i^* c_i \text{ com } \begin{cases} b_i = \langle u_i | \varphi \rangle \\ c_i = \langle u_i | \psi \rangle \end{cases}$$

Note que esse mesmo resultado seria obtido pela multiplicação de matrizes

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \left(b_1^* \ b_2^* \ \dots \ b_i^* \ \dots \right) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{pmatrix} \stackrel{\text{contínua}}{=} \left(\dots \ b^*(\alpha) \ \dots \right) \begin{pmatrix} \vdots \\ c(\alpha) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

- **Representação dos operadores.** Sabendo que $A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle$, definimos:

$$A \doteq \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2j} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \dots & A_{ij} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}.$$

Representação do produto de operadores: AB

Sabendo que $A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle$, e $B_{ij} = \langle u_i | B | u_j \rangle$, represente cada operador por

$$A \doteq \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2j} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \dots & A_{ij} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}.$$

$$B \doteq \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & \dots & B_{1j} & \dots \\ B_{21} & B_{22} & \dots & B_{2j} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ B_{i1} & B_{i2} & \dots & B_{ij} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}.$$

coeficientes de $|u_i\rangle\langle u_j|$



O produto $AB = \mathbb{1}A\mathbb{1}B\mathbb{1} = \sum_{i,l,j} |u_i\rangle A_{il} B_{lj} \langle u_j|$ fica representado por

$$AB \doteq \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2j} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \dots & A_{ij} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & \dots & B_{1j} & \dots \\ B_{21} & B_{22} & \dots & B_{2j} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ B_{i1} & B_{i2} & \dots & B_{ij} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

Os Postulados da Mecânica Quântica

• 1º Postulado:

Em um dado instante t_0 o estado de um sistema físico é definido por um ket $|\psi(t_0)\rangle$ pertencente ao espaço \mathcal{E} .

Comentário(s):

- o No início do curso o estado era $\psi(\vec{r}) \in \mathfrak{F}$. Depois introduzimos os kets $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_{\vec{r}}$, onde $\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$ era apenas a representação de $|\psi\rangle$ no espaço das coordenadas. \mathcal{E} é o espaço $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ estendido para descrever qualquer problema de interesse (com spin, de muitos corpos, etc.)
- o Vale o princípio da superposição: uma combinação linear de vetores estados é um vetor estado.

• 2º Postulado:

Toda quantidade física mensurável A é descrita por um operador A que age em \mathcal{E} ; Este operador é uma observável.

Comentário(s):

- o Um bom exemplo é a quantidade física energia (Hamiltoniana), \mathcal{H} , descrita pelo operador H (a Hamiltoniana do sistema).

Os Postulados: medidas e resultados possíveis.

Comentários (continuação):

- O operador Hamiltoniana do sistema, H , é escrito em termos dos operadores \vec{R} e \vec{P} . Por exemplo, a Hamiltoniana clássica de uma partícula sujeita à um potencial $V(\vec{r})$ é dada por $\mathcal{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$, e na Mecânica Quântica vira o operador

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R}).$$

- Os operadores \vec{R} e \vec{P} , descrevem quantidades físicas mensuráveis, relacionadas às coordenadas canônicas, posição e momento, respectivamente.
- Outros operadores, como os de momento angular orbital e momento angular intrínseco (quantidade física chamada spin), serão apresentados brevemente.

- **3º Postulado:**

O único resultado possível da medida de uma quantidade física \mathcal{A} é um dos autovalores da observável correspondente A .

Comentários:

- A medida de \mathcal{A} é sempre um número real, pois A é Hermiteano.

Os Postulados: medidas e resultados possíveis.

Comentários (continuação):

- Se o espectro de A é discreto, os resultados que podem ser obtidos medindo A são quantizados.

Princípio da Decomposição espectral.

Pode-se dizer que isso seria a generalização do problema de fótons polarizados. Considere o sistema no estado $|\psi\rangle$, tal que $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. O resultado da medida de A associado à A (observável) é um dos autovalores e achá-lo, como no caso de fótons polarizados, tem sentido probabilístico. Para o caso discreto,

$A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle$ com $\sum_n |u_n\rangle\langle u_n| = \mathbb{1} \rightarrow A$ é observável. Podemos escrever

$|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \sum_n |u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle = \sum_n c_n|u_n\rangle$. Defina: $\mathcal{P}(a_n) = |c_n|^2 = |\langle u_n|\psi\rangle|^2$.

- 4º Postulado** (espectro discreto não degenerado):

Quando A é medida em um sistema em um estado normalizado $|\psi\rangle$, a probabilidade $\mathcal{P}(a_n)$ de obter o autovalor não degenerado a_n da observável correspondente A é $\mathcal{P}(a_n) = |\langle u_n|\psi\rangle|^2$, onde $|u_n\rangle$ é o autovetor normalizado de A com autovalor a_n .

Os Postulados: medidas e resultados possíveis.

Comentários:

- Se o espectro de A é discreto e degenerado, poderíamos escrever

$$A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle \text{ com } i = 1, \dots, g_n \text{ e } \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i| = \mathbb{1} \text{ e } \therefore$$

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle. \text{ Neste caso, defina:}$$

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_i^{g_n} |c_n^i|^2 = \sum_i^{g_n} |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2 \text{ e rescreva o postulado.}$$

- 4º Postulado** (espectro discreto):

Quando A é medida em um sistema em um estado normalizado $|\psi\rangle$, a probabilidade $\mathcal{P}(a_n)$ de obter o autovalor a_n , com degenerescência g_n , da

observável correspondente A é $\mathcal{P}(a_n) = \sum_i^{g_n} |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2$, onde o conjunto $\{|u_n^i\rangle\}$

compõe o subespaço \mathcal{E}_n (de dimensão g_n) de autovetores normalizados de A com autovalor a_n .

Os Postulados: medidas e resultados possíveis.

Comentários:

- É natural que $\mathcal{P}(a_n) = \sum_i^{g_n} |c_n^i|^2 = \sum_i^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2$ não dependa da base escolhida

em \mathcal{E}_n . Para perceber isso, lembre que $|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \sum_n \sum_i^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i | \psi \rangle$ e que os c_n^i que aparecem em $\mathcal{P}(a_n)$ são os mesmos que aparecem nessa expansão.

Assim, poderíamos escrever $|\psi_n\rangle = \sum_i^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i | \psi \rangle$ como sendo o pedaço de $|\psi\rangle$

em \mathcal{E}_n . Isso permite definir um projetor em \mathcal{E}_n dado por $P_n = \sum_i^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i |$ de

tal forma que $|\psi_n\rangle = P_n |\psi\rangle$. Note que $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = \sum_i^{g_n} |c_n^i|^2 = \mathcal{P}(a_n)$, ou seja, a

probabilidade de encontrar a_n é o quadrado da norma de $|\psi_n\rangle = P_n |\psi\rangle$. Note que a norma de um ket independe da representação. Podemos ainda escrever

$\mathcal{P}(a_n) = \langle \psi | P_n^\dagger P_n | \psi \rangle$ e isso fornece $\mathcal{P}(a_n) = \langle \psi | P_n | \psi \rangle$. Para fazer uma mudança

de base, usaremos $\mathbb{1}^{(t)} = \sum_n \sum_j^{g_n} |t_n^j\rangle \langle t_n^j |$ nesta expressão.

Os Postulados: medidas e resultados possíveis.

Comentários (continuação):

Com $\mathbb{1}^{(t)} = \sum_n \sum_j^{g_n} |t_n^j\rangle\langle t_n^j|$, podemos escrever

$$P_n = \mathbb{1}^{(t)} \left(\sum_i^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i| \right) \mathbb{1}^{(t)} = \sum_{n'} \sum_j^{g_{n'}} |t_{n'}^j\rangle\langle t_{n'}^j| \left(\sum_i^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i| \right) \sum_{n''} \sum_k^{g_{n''}} |t_{n''}^k\rangle\langle t_{n''}^k|$$

Como os kets $|u_n^i\rangle$, $|t_{n'}^j\rangle$ e $|t_{n''}^k\rangle$ são autokets do mesmo operador, sabemos que são ortogonais a menos que $n'' = n' = n$. Isso permite escrever

$$P_n = \sum_j^{g_n} |t_n^j\rangle\langle t_n^j| \left(\sum_i^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i| \right) \sum_k^{g_n} |t_n^k\rangle\langle t_n^k| = \sum_{ijk}^{g_n} |t_n^j\rangle \underbrace{S_{ji}^{(n)\dagger} S_{ik}^{(n)}}_{\delta_{jk} \text{ e } S \text{ bloco diagonal}} \langle t_n^k| = \sum_j^{g_n} |t_n^j\rangle\langle t_n^j|$$

δ_{jk} e S bloco diagonal

o No caso de um espectro contínuo, teríamos $A|v_\alpha\rangle = \alpha|v_\alpha\rangle$ e $\mathbb{1} = \int d\alpha |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha|$.

Isso permite escrever $|\psi\rangle = \int d\alpha c(\alpha)|v_\alpha\rangle$ com $c(\alpha) = \langle v_\alpha|\psi\rangle$. Com isso, define-se

$d\mathcal{P}(\alpha) = \rho(\alpha)d\alpha$ $\left\{ \begin{array}{l} \text{probabilidade de encontrar um valor incluído entre } \alpha \text{ e } \alpha + d\alpha, \\ \text{onde } \rho(\alpha) = |c(\alpha)|^2 = |\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2 \text{ é a densidade de probabilidade.} \end{array} \right.$

Os Postulados: medidas e resultados possíveis.

- **4º Postulado** (espectro contínuo não-degenerado):

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 $d\mathcal{P}(\alpha)=\rho(\alpha)d\alpha=|\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2d\alpha$, onde $|v_\alpha\rangle$ é um autovetor correspondendo ao autovalor α da observável A associada com \mathcal{A} .

Comentários sobre as 3 versões do postulado 4:

- Quanto vale $\sum_n \mathcal{P}(a_n)$? e $\int d\mathcal{P}(\alpha) = \int d\alpha \rho(\alpha)$?
- Como $\mathcal{P}(a_n) = \sum_i^{g_n} |c_n^i|^2 = \sum_i^{g_n} |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2 = \sum_i^{g_n} \langle \psi|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi\rangle$, temos

$$\sum_n \mathcal{P}(a_n) = \langle \psi | \left(\sum_n \sum_i^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i| \right) | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{1} | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1$$

Isso está de acordo com nossas expectativas: uma medida de \mathcal{A} fornece necessariamente um dos autovalores de A . Portanto, a soma das probabilidades de encontrar um deles é igual à 1. Repita o procedimento e mostre que

$$\int d\mathcal{P}(\alpha) = \int d\alpha \rho(\alpha) = \langle \psi | \psi \rangle = 1$$

Os Postulados: medidas e resultados possíveis.

Comentários sobre as 3 versões do postulado 4 (continuação):

- o Como $\sum_n \mathcal{P}(a_n) = \int d\mathcal{P}(\alpha) = \langle \psi | \psi \rangle$, para garantir que a soma sobre todo o

espectro seja 1, basta redefinir $\begin{cases} d\mathcal{P}(\alpha) = \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha \\ \mathcal{P}(a_n) = \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} \sum_i^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2 \end{cases} \Rightarrow \text{vale } \forall \langle \psi | \psi \rangle$

- o Sempre consideraremos $|\psi\rangle$ como uma combinação de autovetores de A , \therefore é essencial que A seja uma observável.
- o Note que poderíamos ter feito casos mais gerais misturando espectros discretos e contínuos.
- o Tenho dito sistematicamente que constantes multiplicativas não modificam a informação física contida no ket. O postulado 4 permite entender melhor esta afirmação. Primeiro considere dois kets $|\psi\rangle$ e $|\psi'\rangle$ igualmente normalizados, mas diferindo por uma fase $|\psi'\rangle = e^{i\theta} |\psi\rangle$, onde θ é um número real. Primeiro note

que $\begin{cases} \langle \psi' | \psi' \rangle = \langle \psi | e^{-i\theta} e^{i\theta} | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle \\ |\langle u_i | \psi' \rangle|^2 = |\langle u_i | e^{i\theta} | \psi \rangle|^2 = |\langle u_i | \psi \rangle|^2 \end{cases}$ e conclua que $\mathcal{P}(a_n)$ dá o mesmo

resultado para $|\psi\rangle$ e $|\psi'\rangle$. Isso vale também para $|\psi'\rangle = c|\psi\rangle$.

Os Postulados: medidas e resultados possíveis.

Comentários sobre as 3 versões do postulado 4 (continuação):

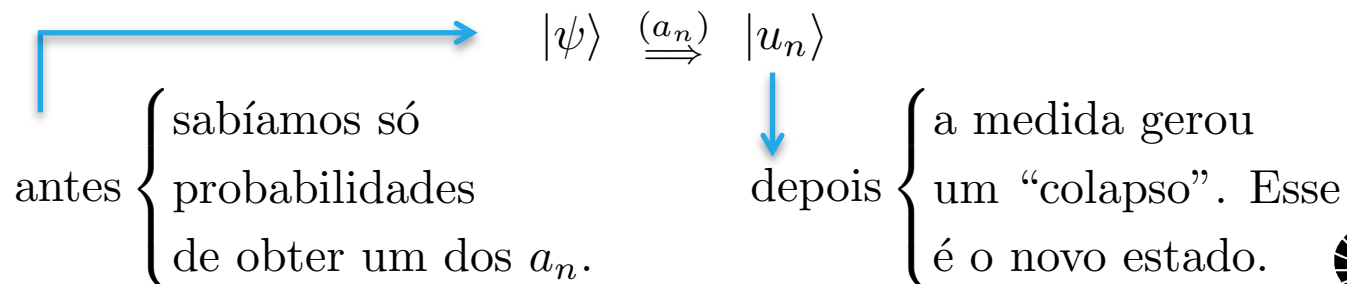
- Assim, dois estados que diferem por um fator complexo representam o mesmo estado físico. Seja cuidadoso com esse conceito, pois $|\psi\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle$ e $|\phi\rangle = \lambda_1e^{i\theta_1}|\psi_1\rangle + \lambda_2e^{i\theta_2}|\psi_2\rangle$ são distintos, a menos que $\theta_1 = \theta_2 + 2\pi n$, com n inteiro, pois nesse caso $|\psi\rangle = e^{i\theta_1}|\phi\rangle$. Conclui-se que:

Um fator de fase global não afeta as previsões físicas, mas as fases relativas dos coeficientes de uma expansão são significativas.

- Redução do pacote de onda devido à uma medida**

- Caso espectro discreto (inspirados nos experimentos de ótica):

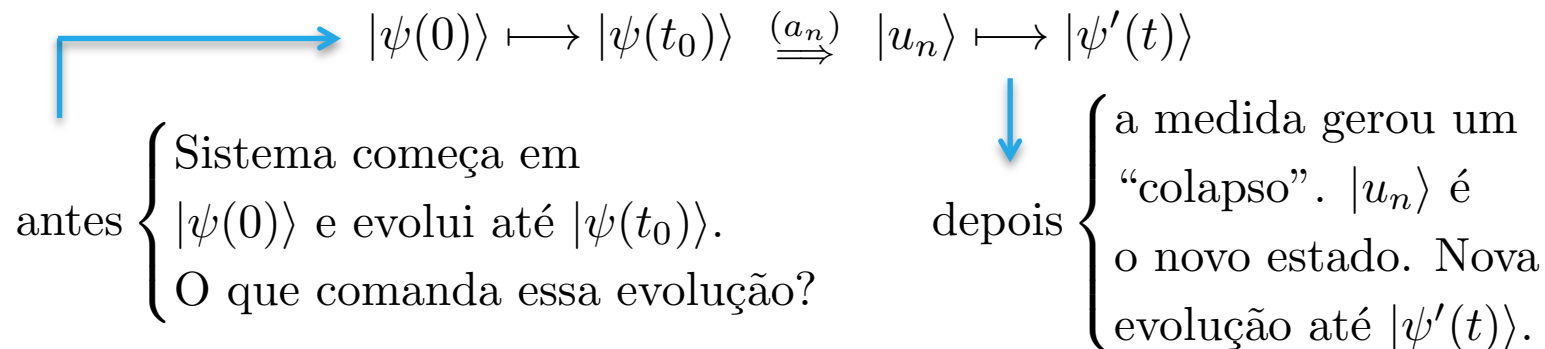
Suponha que o sistema esteja em um estado qualquer $|\psi\rangle$, quando se faz uma medida da quantidade física \mathcal{A} e um dos autovalores a_n da observável A é obtido. Representamos isso por:



Os Postulados: medidas e resultados possíveis.

Comentários: preparação para o postulado 5:

- A figura do slide anterior representa o 5o. postulado. De fato, a situação que desejamos estudar é um pouco mais complexa e poderia ser representada por:



- Caso fizéssemos outra medida imediatamente após t_0 (sem dar tempo do estado evoluir), encontraríamos a_n .

- Se a_n fosse degenerado, escreva o estado por $|\psi\rangle = \sum_n \sum_i^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle$.

$$|\psi\rangle \xrightarrow{(a_n)} \sum_i^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle \text{ normalizado para } \frac{1}{\sqrt{\sum_i^{g_n} |c_n^i|^2}} \sum_i^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle$$

- Note que $\sum_i^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle = |\psi_n\rangle$ é a projeção de $|\psi\rangle$ sobre \mathcal{E}_n (subespaço dos

autovetores com autovalor a_n . Resumindo: $|\psi\rangle \xrightarrow{(a_n)} \frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}}$

A medida gerando um colapso.

- 5º Postulado:

Se a medida de uma quantidade física 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, $\frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}$, de $|\psi\rangle$ sobre o subespaço associado com a_n .

Comentários

- Note que após a medida, o novo estado é um autoestado de A com autovalor a_n .
- Não é qualquer estado. É a projeção de $|\psi\rangle$ em \mathcal{E}_n .
- Considere $g_n = 1$.

Após a medida, teríamos $\frac{c_n}{|c_n|}|u_n\rangle = e^{i \arg c_n}|u_n\rangle \rightarrow$ mesmo que $|u_n\rangle$.

Estamos prontos para estudar a evolução temporal do sistema.

Conforme esperado a Hamiltoniana terá papel especial. Em F689, aprendemos a prever o resultado da evolução

$$|\psi(0)\rangle \xrightarrow{H} |\psi(t_0)\rangle \xrightarrow{(a_n)} |u_n\rangle \xrightarrow{H} |\psi'(t)\rangle$$

Evolução Temporal

• 6º Postulado:

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 $\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$, com $\vec{p} = m \frac{d\vec{r}}{dt} = m\vec{v}$.
- Segundo o que discutimos, a Hamiltoniana quântica fica $H = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{R})$.
- E a equação de Schrödinger do sistema é: $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \left[\frac{P^2}{2m} + V(\vec{R}) \right] |\psi(t)\rangle$.
- A Hamiltoniana de uma partícula sujeita a um potencial vetor e a um potencial escalar dependentes do tempo.

Vimos no semestre passado 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} .

De F689 ainda falta falar de spin, oscilador harmônico, momento angular e átomo de hidrogênio

- A revisão sobre spin e momento angular será feita quando esses assuntos voltarem à cena nos capítulos 9 e 10.
- A revisão sobre oscilador harmônico e átomo de hidrogênio fica por conta de vocês e é essencial nas aplicações de teoria de perturbação (capítulos 11, 12 e 13).
- A revisão sobre análogos clássicos da mecânica quântica será feita sempre que necessária.
- Vale a pena você passar os olhos em todos os slides de F689. Não deixe de fazer isso.
- Nosso primeiro assunto é teoria de espalhamento. Em seguida falaremos sobre spin e soma de momentos angulares. O próximo desafio está em estabelecer métodos de aproximação (a natureza é complicada e gerar estratégias de aproximação é essencial). Finalmente falaremos de partículas idênticas (a mecânica quântica mostrará resultados surpreendentes).

