F 689 – Mecânica Quântica I

2º Semestre de 2022
03/10/2022
Aula 12

Aula passada

Postulado 1: O estado de um sistema físico num instante t_0 é determinado por um ket do espaço de estados $\mathcal{E}$:

$$|\psi(t_0)\rangle \in \mathcal{E}$$

Postulado 2: Toda quantidade física $\mathcal{A}$ é descrita por um operador A que age em $\mathcal{E}$. A é um observável, ou seja, um operador Hermitiano cujos auto-estados formam uma base de $\mathcal{E}$.

Postulado 3: Os únicos resultados possíveis de serem obtidos em uma medida de $\mathcal{A}$ são os auto-valores do operador A.

Aula passada

Postulado 4 (Princípio da decomposição espectral): Se o estado do sistema é $|\psi\rangle$ a probabilidade de se obter um determinado auto-valor de A é:

a) Espectro de A é discreto: $A\left|u_n^i\right\rangle = a_n\left|u_n^i\right\rangle, \ (i = 1, 2, \ldots, g_n) \quad \left\langle u_m^i | u_n^j\right\rangle = \delta_{mn}\delta_{ij}$

$$\boxed{P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n}\left|\left\langle u_n^i|\psi\right\rangle\right|^2 = \langle\psi|P_n|\psi\rangle, \quad P_n = \sum_{i=1}^{g_n}\left|u_n^i\right\rangle\left\langle u_n^i\right|}$$

b) Espectro de A é contínuo: $A|v_\alpha\rangle = \alpha|v_\alpha\rangle, \quad \langle v_\alpha|v_{\alpha'}\rangle = \delta(\alpha - \alpha')$

Probabilidade de obter α no intervalo $[\alpha, \alpha + \mathrm{d}\alpha]$

$$\boxed{dP(\alpha) = |\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2 d\alpha = \langle\psi|P_\alpha|\psi\rangle, \quad P_\alpha = |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha|}$$

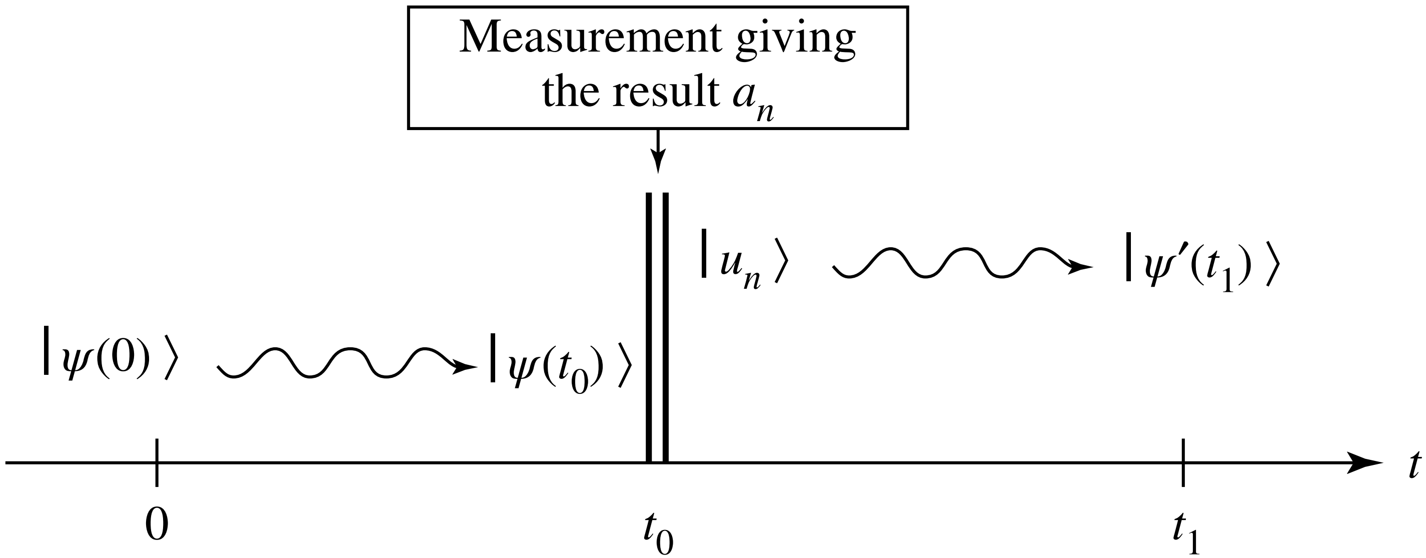
$$P(\alpha \in [a, b]) = \int_a^b |\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2 d\alpha$$

Aula passada

Postulado 5 (Colapso da função de onda): Se o estado do sistema é $|\psi\rangle$ e, na medida de um observável A obtém-se o auto-valor a_n, então, imediatamente após a medida o estado do sistema passa a ser

$$\frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}$$

que é a projeção normalizada no auto-sub-espaço de a_n.



Aula passada

Postulado 6: A evolução temporal do sistema é determinada pela equação de Schrödinger

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

onde $H(t)$ é o Hamiltoniano do sistema (geralmente sua energia total).

Regras de quantização

PARA A POSIÇÃO $\vec{r}=(x,y,z)$ ASSOCIAMOS OS OPERADORES: (X,Y,Z)

PARA O MOMENTO LINEAR: $\vec{p}=(p_x,p_y,p_z)$

ASSOCIAMOS OS OPERADORES: (P_x,P_y,P_z)

DA MECÂNICA CLÁSSICA, QUALQUER QUANTIDADE FÍSICA É $f_{cl}(\vec{r},\vec{p})$ À QUAL ASSOCIAMOS

$f_{cl}(\vec{R},\vec{P})$. POR EXEMPLO:

$$\ell_z = x p_y - y p_x \longrightarrow L_z = X P_y - Y P_x$$

NA REPRESENTAÇÃO DE POSIÇÃO: $L_z \to x\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\right) - y\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)$

MAS HÁ UMA SUTILEZA: QUAL É O OBSERVÁVEL ASSOCIADO A $x p_x$?

$$x p_x \longrightarrow X P_x \quad \text{OU} \quad P_x X$$

NESSES CASOS, SIMETRIZA-SE O PRODUTO:

$$x p_x \longrightarrow \frac{1}{2}\left(X P_x + P_x X\right) = \frac{1}{2}\left[2 X P_x - i\hbar\right] = X P_x - i\frac{\hbar}{2}$$

$$[X, P_x] = i\hbar \Rightarrow X P_x - P_x X = i\hbar \Rightarrow P_x X = X P_x - i\hbar$$

$$x^2 p_x \longrightarrow \frac{1}{3}\left(X^2 P_x + X P_x X + P_x X^2\right)$$

A interpretação probabilística da função de onda

Em 1D: MEDIR A POSIÇÃO X: $X|x\rangle = x|x\rangle$ $x \in (-\infty, +\infty)$

PROBABILIDADE DE SE OBTER A POSIÇÃO EM $[x, x+dx]$

$$dP(x) = |\underbrace{\langle x|\psi\rangle}_{\psi(x)}|^2 dx$$ (POSTULADO 4)

$$dP(x) = |\psi(x)|^2 dx$$ (REGRA DE BORN)

SE EU MEDIR O MOMENTO LINEAR P_x? $P_x|p_x\rangle = p_x|p_x\rangle$

PROB. DE OBTER MOM. LINEAR EM $[p_x, p_x+dp_x]$ $\downarrow$

$p_x \in (-\infty, +\infty)$

$$dP(p_x) = |\underbrace{\langle p_x|\psi\rangle}_{\bar{\psi}(p_x)}|^2 dp_x = |\bar{\psi}(p_x)|^2 dp_x$$

Em 3D: $X|\vec{r}\rangle = x|\vec{r}\rangle$ ou $X|x,y,z\rangle = x|x,y,z\rangle$

$|\vec{r}\rangle \equiv |x,y,z\rangle$

$$dP(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} dz \, |\underbrace{\langle x,y,z|\psi\rangle}_{\psi(\vec{r})}|^2 \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} dz \, |\psi(\vec{r})|^2 dx$$

$$P_x|\vec{p}\rangle = p_x|\vec{p}\rangle \Leftrightarrow P_x|p_x,p_y,p_z\rangle = p_x|p_x,p_y,p_z\rangle$$

$$dP(p_x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp_y \int_{-\infty}^{+\infty} dp_z \, |\langle p_x p_y p_z|\psi\rangle|^2 dp_x$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dp_y \int_{-\infty}^{+\infty} dp_z \, |\bar{\psi}(\vec{p})|^2 dp_x$$

O valor médio de um observável

Caso discreto: EM ESTATÍSTICA, UMA VARIÁVEL ALEATÓRIA $a_n = \{a_1, a_2, \ldots a_n \ldots\}$ COM PROBABILIDADES $P(a_n) = \{P(a_1), P(a_2), \ldots\}$, DEFINE-SE O VALOR MÉDIO OU ESPERADO DESSA VARIÁVEL COMO:

$$\bar{a} = \sum_n a_n P(a_n)$$

NO CASO QUÂNTICO: $\bar{a} = \langle a \rangle = \sum_n a_n P(a_n)$

$$\Rightarrow \langle a \rangle = \sum_n a_n \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2 = \sum_n a_n \sum_{i=1}^{g_n} \langle \psi | u_n^i \rangle \langle u_n^i | \psi \rangle$$

$$= \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \langle \psi | \underbrace{a_n | u_n^i \rangle}_{A|u_n^i\rangle} \langle u_n^i | \psi \rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \langle \psi | A | u_n^i \rangle \langle u_n^i | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | A \underbrace{\sum_n \sum_i | u_n^i \rangle \langle u_n^i |}_{\mathbb{1}} | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

DE MANEIRA GERAL: $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$

A INTERPRETAÇÃO ESTATÍSTICA:

(i) PREPARA O SISTEMA NO ESTADO $|\psi\rangle$

E MEDE-SE A QUANTIDADE $\underline{A}$, N VEZES

(ESSE CONJUNTO DE ESTADOS PREPARADOS N VEZES É CHAMADO DE "ENSEMBLE")

ii) TOMA-SE A MÉDIA AMOSTRAL:

$$\bar{a} = \lim_{N \to \infty} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} a_i \right] = \langle a \rangle$$

Caso contínuo: $\langle a \rangle = \int d\alpha \; \alpha \; P(\alpha) = \int d\alpha \; \alpha \; |\langle \theta_\alpha | \psi \rangle|^2$

$\ldots\ldots \Rightarrow \quad \langle a \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$

Exemplos: POSIÇÃO: (1D)

$$\langle X \rangle = \langle \psi | X | \psi \rangle = \int dx \, \underbrace{\langle \psi | X | x \rangle}_{x\,\psi^*(x)} \underbrace{\langle x | \psi \rangle}_{\psi(x)}$$

$$= \int dx \, x \, |\psi(x)|^2$$

$$\langle P_x \rangle = \langle \psi | P_x | \psi \rangle = \int dp_x \, \underbrace{\langle \psi | P_x | p_x \rangle}_{p_x\,\Phi^*(p_x)} \underbrace{\langle p_x | \psi \rangle}_{\Phi(p_x)}$$

$$= \int dp_x \, p_x \, |\Phi(p_x)|^2$$

(3D):

$$\langle x \rangle = \langle \psi | X | \psi \rangle = \int dx\,dy\,dz\, \underbrace{\langle \psi | X | x,y,z \rangle}_{x\,\psi^*(\vec{r})} \underbrace{\langle x,y,z | \psi \rangle}_{\psi(\vec{r})}$$

$$\Rightarrow \langle x \rangle = \int \underbrace{dx\,dy\,dz}_{d^3r}\; x\, |\psi(\vec{r})|^2$$

Exemplo

Base: $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$

Observável: $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 2 & 0 \\ i & 0 & 2 \end{pmatrix}$

Estado:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{2}|2\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle$$

Qual é o valor esperado de A no estado acima? $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$

$$\langle A \rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 2 & 0 \\ i & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{2}} - \frac{i}{2} \\ 1 \\ \frac{i}{\sqrt{2}} + 1 \end{pmatrix} = 1 - \cancel{\frac{i}{2\sqrt{2}}} + \frac{1}{2} + \cancel{\frac{i}{2\sqrt{2}}} + \frac{1}{2} = 2$$

Da aula passada:

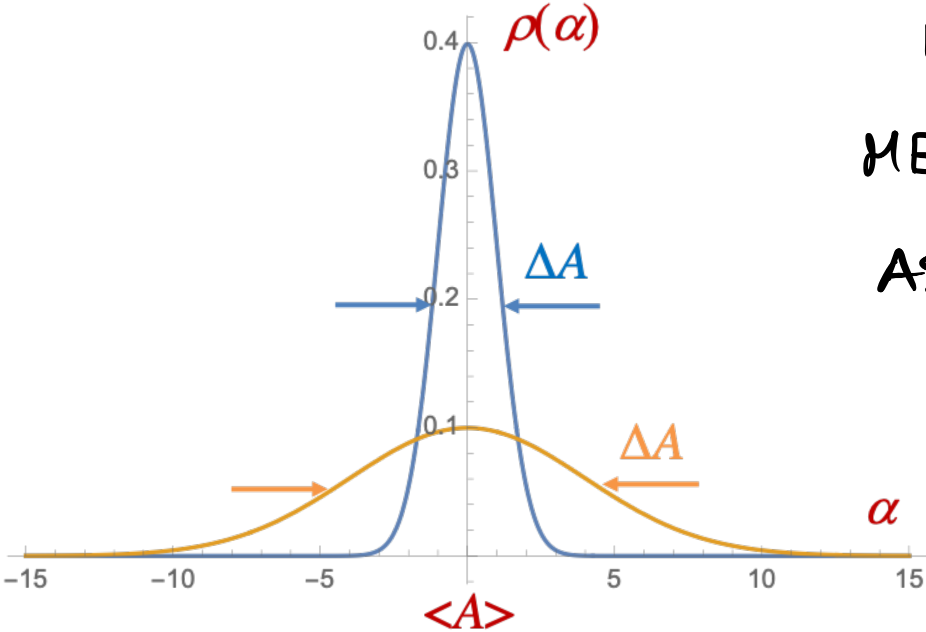
Auto − valor	Probabilidade
$a_1 = 1$	$P(a_1) = 3/8$
$a_2 = 2$	$P(a_2) = 1/4$
$a_3 = 3$	$P(a_3) = 3/8$

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n P(a_n) = \left[1 \times \frac{3}{8} + 2 \times \frac{1}{4} + 3 \times \frac{3}{8} \right]$$

$$= \frac{3}{8} + \frac{4}{8} + \frac{9}{8} = \frac{16}{8} = 2$$

$$\left(\langle \psi | A | \psi \rangle \right)^* = \langle \psi | A^+ | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \Rightarrow \text{REAL}$$

Desvio quadrático médio



NOS CASOS AO LADO, AS MÉDIAS $\langle A \rangle$ SÃO IGUAIS, MAS AS LARGURAS OU DISPERSÕES ΔA SÃO DIFERENTES. COMO QUANTIFICAR ISSO?

$$\langle (A - \langle A \rangle) \rangle = \langle A \rangle - \langle A \rangle = 0$$ (NÃO SERVE)

ALTERNATIVA: $\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \Rightarrow \Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}$

$\Rightarrow$ DESVIO QUADRÁTICO MÉDIO

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle (A^2 - 2\langle A \rangle A + (\langle A \rangle)^2) \rangle$$

$$= \langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle \langle A \rangle + (\langle A \rangle)^2 = \langle A^2 \rangle - (\langle A \rangle)^2$$

$$\Delta A^2 = \langle A^2 \rangle - (\langle A \rangle)^2$$

PRECISO DE $\langle A \rangle$ E $\langle A^2 \rangle$

O princípio de incerteza de Heisenberg

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - (\langle x \rangle)^2$$

$$(\Delta P_x)^2 = \langle P_x^2 \rangle - (\langle P_x \rangle)^2$$

COMPLEMENTO C_{III} : PARA QUALQUER $|\psi\rangle$

$$\Delta x \, \Delta P_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta y \, \Delta P_y \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta z \, \Delta P_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

Exemplo

Base: $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$

Observável: $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 2 & 0 \\ i & 0 & 2 \end{pmatrix}$

Estado:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{2}|2\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle$$

Qual é o desvio quadrático médio de A no estado acima?

$$A^2 = \begin{pmatrix} 5 & 0 & -4i \\ 0 & 4 & 0 \\ 4i & 0 & 5 \end{pmatrix} \Rightarrow \langle A^2 \rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 0 & -4i \\ 0 & 4 & 0 \\ 4i & 0 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5/\sqrt{2} - 2i \\ 2 \\ \frac{4i}{\sqrt{2}} + \frac{5}{2} \end{pmatrix} = \frac{5}{2} - \frac{2i}{\sqrt{2}} + 1 + \frac{2i}{\sqrt{2}} + \frac{5}{4} = \frac{19}{4}$$

$\text{Auto} - \text{valor}$	Probabilidade
$a_1 = 1$	$P(a_1) = 3/8$
$a_2 = 2$	$P(a_2) = 1/4$
$a_3 = 3$	$P(a_3) = 3/8$

$$\langle A^2 \rangle = \sum_n a_n^2 P(a_n) = \frac{19}{4}$$

$$\Delta A^2 = \frac{19}{4} - (2)^2 = \frac{3}{4}$$

$$\Delta A = \frac{\sqrt{3}}{2} \simeq 0{,}866$$

Pacote de incerteza mínima

Como mostrado no complemento C_{III}, a função de onda que satura o princípio de incerteza (pacote de incerteza mímica) é uma gaussiana:

$$\boxed{\Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}} \Rightarrow \psi(x) = \frac{1}{\left[2\pi (\Delta x)^2\right]^{1/4}} e^{i\langle p\rangle x/\hbar} \exp\left[-\left(\frac{x-\langle x\rangle}{2\Delta x}\right)^2\right]$$

$$\Delta p_x = \frac{\hbar}{2(\Delta x)}$$

Ela também é uma gaussiana no espaço de Fourier:

$$\boxed{\Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}} \Rightarrow \overline{\psi}(p) = \frac{1}{\left[2\pi (\Delta p)^2\right]^{1/4}} e^{-i\langle x\rangle p/\hbar} \exp\left[-\left(\frac{p-\langle p\rangle}{2\Delta p}\right)^2\right]$$