F 689 – Mecânica Quântica I

2º Semestre de 2022
05/10/2022
Aula 13

Aula passada

Regras de quantização: Para achar o operador correspondente a uma quantidade clássica, escreva-a como função de $\mathbf{r}$ e $\mathbf{p}$ e substitua esses por seus operadores $\mathbf{R}$ e $\mathbf{P}$:

$$f_{cl}\left(\mathbf{r},\mathbf{p}\right) \rightarrow f_{cl}\left(\mathbf{R},\mathbf{P}\right) \rightarrow f\left(\mathbf{r},\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla}\right)$$

Exemplo: momento angular

$$l_z = xp_y - yp_x \rightarrow L_z = XP_y - YP_x \rightarrow x\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\right) - y\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Quando há produtos de operadores que não comutam, simetrize:

$$\begin{aligned} XP_x &\rightarrow \frac{1}{2}\left(XP_x + P_xX\right) \\ X^2P_x &\rightarrow \frac{1}{3}\left(X^2P_x + XP_xX + P_xX^2\right) \\ &\vdots \quad \vdots \quad \vdots \end{aligned}$$

Aula passada

Valor médio de um operador num estado |ψ>:

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

$$\langle A\rangle = \int \alpha P(\alpha)\, d\alpha = \int \alpha \left|\langle v_\alpha|\psi\rangle\right|^2 d\alpha = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

Desvio quadrático médio (largura) de um operador num estado |ψ>:

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

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2}$$

Formulação precisa do princípio de incerteza de Heisenberg:

$$\boxed{\begin{aligned} \Delta x \Delta p_x &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta y \Delta p_y &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta z \Delta p_z &\geq \frac{\hbar}{2} \end{aligned}}$$

Observáveis compatíveis

DOIS OBSERVÁVEIS SÃO DITOS COMPATÍVEIS SE ELES COMUTAM ENTRE SI: $[A,B]=0$

VAMOS PROVAR QUE DADOS A E B COMPATÍVEIS:

(i) MEDIDAS FEITAS UMA APÓS A OUTRA DE A E B EM QUALQUER ORDEM DÃO RESULTADOS COM A MESMA PROBABILIDADE.

(ii) O ESTADO COLAPSA NO MESMO ESTADO FINAL TAMBÉM INDEPENDENTE DA ORDEM DAS MEDIDAS.

SE $[A,B]=0$, ENTÃO EXISTE UMA BASE DE AUTOVETORES COMUNS A A E B: $|a_n, b_m, i\rangle$ (i É NECESSÁRIO SE $\{A,B\}$ NÃO SÃO CCOC)

$$A|a_n, b_m, i\rangle = a_n|a_n, b_m, i\rangle$$

$$B|a_n, b_m, i\rangle = b_m|a_n, b_m, i\rangle$$

$$\langle a_{n'}, b_{m'}, i|a_n, b_m, j\rangle = \delta_{ij} \times \delta_{nn'} \times \delta_{mm'}$$

UM ESTADO GENÉRICO $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_{n,m,i} c^i_{m,n} |a_n, b_m, i\rangle ; \quad \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

1) MEÇO A E LOGO DEPOIS B: ANÁLISE DA SITUAÇÃO EM QUE OS RESULTADOS SÃO: (a_n, b_m)

1ª MEDIDA:
$$P_1(a_n) = \sum_{m,i} |c^i_{m,n}|^2$$

E O ESTADO APÓS A MEDIDA É:

$$|\psi_{1n}\rangle = K \sum_{m,i} c^i_{m,n} |a_n, b_m, i\rangle = \frac{\sum_{m,i} c^i_{m,n} |a_n, b_m, i\rangle}{\left(\sum_{m,i} |c^i_{m,n}|^2\right)^{1/2}}$$

2ª MEDIDA:
$$P_2(b_m) = \frac{\sum_i |c^i_{m,n}|^2}{\sum_{m,i} |c^i_{m,n}|^2}$$

E O ESTADO FINAL É:

$$|\psi_{2\,n,m}\rangle = K \sum_i c^i_{m,n} |a_n, b_m, i\rangle = \frac{\sum_i c^i_{m,n} |a_n, b_m, i\rangle}{\left[\sum_i |c^i_{m,n}|^2\right]^{1/2}}$$

A PROBABILIDADE TOTAL DE OBTER (a_n, b_m) É:

$$P(a_n, b_m) = P_1(a_n) P_2(b_m) = \sum_i |c^i_{n,m}|^2$$

2) MEÇO $\underline{B}$ E, LOGO DEPOIS, $\underline{A}$: OS MESMOS (a_n, b_m)

$$P_1(b_m) = \sum_{n,i} |c^i_{n,m}|^2$$

$$|\psi_{1m}\rangle = \frac{\sum_{n,i} c^i_{n,m} |a_n, b_m, i\rangle}{\left[\sum_{n,i} |c^i_{n,m}|^2\right]^{1/2}}$$

$$P_2(a_n) = \frac{\sum_i |c^i_{n,m}|^2}{\sum_{n,i} |c^i_{n,m}|^2}$$

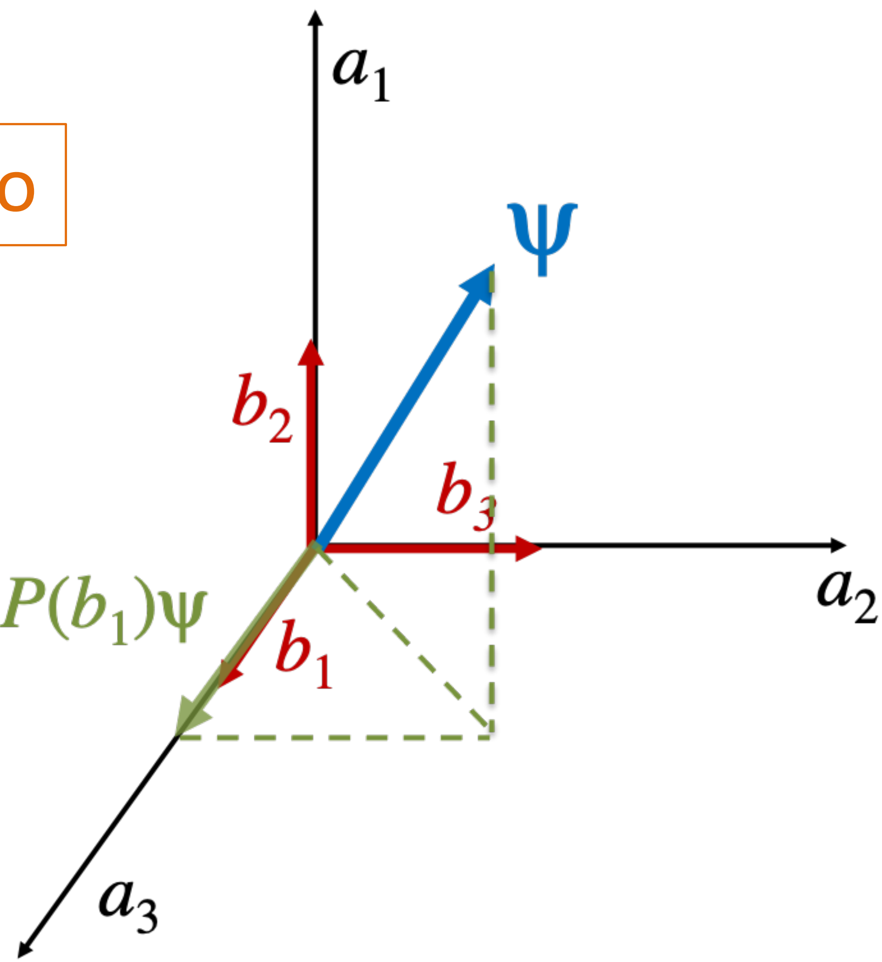
$$|\psi'_{2,n,m}\rangle = \frac{\sum_i c^i_{n,m} |a_n, b_m, i\rangle}{\left[\sum_i |c^i_{n,m}|^2\right]^{1/2}} = |\psi_{2\,n,m}\rangle$$

$$P(b_m, a_n) = P_1(b_m) P_2(a_n) = \sum_i |c^i_{n,m}|^2 = P(a_n, b_m)$$

Interpretação geométrica: Observáveis compatíveis tem uma base de auto-vetores simultâneos ortonormais (eixos a_i e b_j abaixo). Uma medida em um estado $|\psi>$ que dê como resultao, por exemplo, a_3 e b_1, tem a mesma probabilidade (modúlo quadrado da projeção de $|\psi>$ na direção do auto-vetor $|a_3,b_1>$) e colapsa no mesmo estado final (projeção de $|\psi>$ na direção do auto-vetor $|a_3,b_1>$), independente da ordem das medidas (A e depois B ou B e depois A).

Caso não degenerado

$$P(b_1)P(a_3)\psi = P(a_3)P(b_1)\psi$$



Preparação de um estado

$$|\psi_f\rangle = \frac{\sum_i c^i_{n,m}|a_n, b_m, i\rangle}{\left[\sum_i |c^i_{n,m}|^2\right]^{1/2}}$$

SE $\{A, B\}$ FORMAM UM CCOC:

$$|\psi_f\rangle = \frac{c_{n,m}|a_n, b_m\rangle}{\left[|c_{n,m}|^2\right]^{1/2}} = \frac{c_{n,m}}{|c_{n,m}|}|a_n, b_m\rangle = e^{i\theta}|a_n, b_m\rangle$$

MAS A FASE $e^{i\theta}$ <u>NÃO</u> TEM CONSEQUÊNCIAS FÍSICAS.

LOGO, O ESTADO FINAL É ÚNICO.

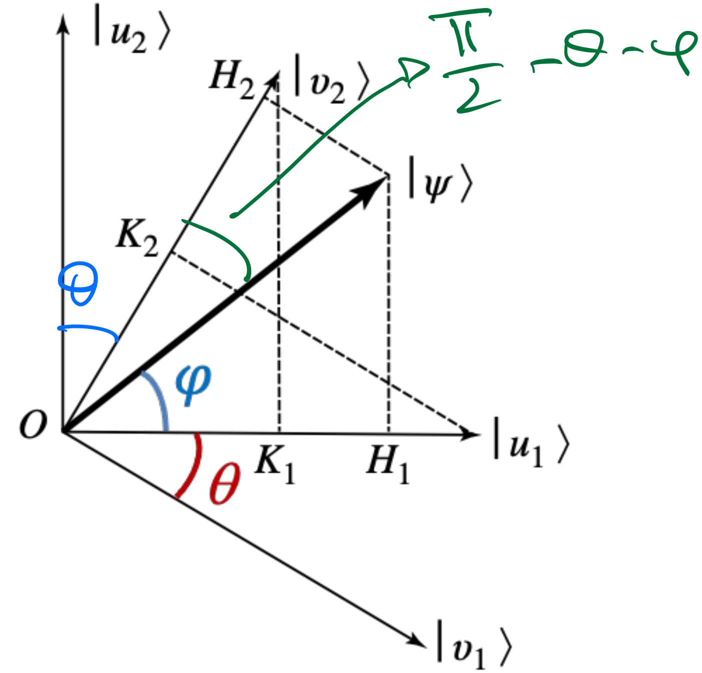
ASSIM, PREPARA-SE UM ESTADO BEM DEFINIDO $|a_n, b_m\rangle$.

Observáveis incompatíveis

ESPAÇO BI-DIMENSIONAL E $[A,B] \neq 0$

A TEM AUTO-VALORES (a_1, a_2) E

AUTO-VETORES $(|u_1\rangle, |u_2\rangle)$



$B \to (b_1, b_2)$ E $(|v_1\rangle, |v_2\rangle)$

$|v_1\rangle = \cos\theta\,|u_1\rangle - \sin\theta\,|u_2\rangle$

$|v_2\rangle = \sin\theta\,|u_1\rangle + \cos\theta\,|u_2\rangle$

1) MEÇO $\underline{A}$ E DEPOIS $\underline{B}$ (ESTADO INICIAL $|\psi\rangle$)

$|\psi\rangle = c_1|u_1\rangle + c_2|u_2\rangle = \cos\varphi\,|u_1\rangle + \sin\varphi\,|u_2\rangle$

$P_1(a_1) = |c_1|^2 = |\langle u_1|\psi\rangle|^2 = \cos^2\varphi$ E $|\psi_{1,a_1}\rangle = |u_1\rangle$

$P_2(b_2) = |\langle v_2|\psi_{1,a_1}\rangle|^2 = |\langle v_2|u_1\rangle|^2 = \sin^2\theta$ E $|\psi_f^1\rangle = |v_2\rangle$

2) MEÇO $\underline{B}$ E DEPOIS $\underline{A}$: ($|\psi\rangle$)

$$P_1(b_2) = |\langle \vartheta_2|\psi\rangle|^2 = \cos^2\left(\frac{\pi}{2}-\theta-\varphi\right) = \sin^2(\theta+\varphi)$$

$$|\psi_{1b_2}\rangle = |\vartheta_2\rangle$$

$$P_2(a_1) = |\langle u_1|\psi_{1b_2}\rangle|^2 = |\langle u_1|\vartheta_2\rangle|^2 = \sin^2\theta$$

$$|\psi_f^2\rangle = |u_1\rangle$$

$$\Rightarrow \quad |\psi_f^1\rangle = |\vartheta_2\rangle \neq |\psi_f^2\rangle = |u_1\rangle$$

$$P_1(a_1)P_2(b_2) = \cos^2\varphi \sin^2\theta \neq P_1(b_2)P_2(a_1) = \sin^2(\theta+\varphi)\sin^2\theta$$

Considerações gerais sobre a Equação de Schrödinger

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

$$\frac{d\,|\psi(t)\rangle}{dt} = \lim_{\Delta t \to 0}\left[\frac{|\psi(t+\Delta t)\rangle - |\psi(t)\rangle}{\Delta t}\right]$$

Linearidade

A EQ. DE SCHRÖDINGER É LINEAR:

SE $|\psi_1(t)\rangle$ E $|\psi_2(t)\rangle$ SÃO 2 SOLUÇÕES DA E.S.

ENTÃO:

$$|\psi(t)\rangle = \lambda_1 |\psi_1(t)\rangle + \lambda_2 |\psi_2(t)\rangle$$

TAMBÉM É SOLUÇÃO:

Primeira ordem na derivada temporal

DADO O ESTADO INICIAL $|\psi(t_0)\rangle$ EM $t=t_0$, A E.S. PERMITE OBTER $|\psi(t)\rangle$ $\forall\, t \neq t_0$

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{dt} \cong i\hbar \left[\frac{|\psi(t+\Delta t)\rangle - |\psi(t)\rangle}{\Delta t} \right] = H(t)\,|\psi(t)\rangle$$

$$\Rightarrow |\psi(t_0+\Delta t)\rangle = |\psi(t_0)\rangle + \frac{\Delta t}{i\hbar} H(t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

$$|\psi(t_0+2\Delta t)\rangle = |\psi(t_0+\Delta t)\rangle + \frac{\Delta t}{i\hbar} H(t_0+\Delta t)\,|\psi(t_0+\Delta t)\rangle$$

E ASSIM POR DIANTE.

Invariância da norma

SE $\langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle = 1$, $\Rightarrow$ $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1 \quad \forall t$

PROVA:

$$\frac{d}{dt}\left[\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle\right] = \left[\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right]|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\underbrace{\left[\frac{d}{dt}\left[|\psi(t)\rangle\right]\right]}_{\frac{H}{i\hbar}|\psi(t)\rangle}$$

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

TOMANDO O BRA:

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

$$= \frac{-1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H(t)|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H(t)|\psi(t)\rangle = 0$$