Aula 20 (15/Mar)

No aula de hoje:

* Revisão das aulas anteriores.
* Variáveis incompatíveis e relações de incerteza.
* Propriedades da evolução temporal de um sistema quântico.

Revisão da aula anterior

* Postulados da Mecânica Clássica.
* Postulados da Mecânica Quântica.
* Quantificação Canónica
* Variáveis compatíveis e incompatíveis.

5.4) Variáveis compatíveis e incompatíveis (cont.)

5.4.3) Variáveis incompatíveis e relações de incerteza.

Consideremos duas observáveis compatíveis tal que $[\hat{A},\hat{B}]=0$. Consideremos também o estado $|\psi\rangle$ que podemos escrever, em termos da base de auto-

- vectores de $\hat{A}$ e de $\hat{B}$, i.e. $\{|a_n, b_p, i\rangle\}$ onde a_n e b_p são auto-vals. de $\hat{A}$ e $\hat{B}$, sendo $\underline{i}$ a degenerescência do par (a_n, b_p),

$$|\psi\rangle = \sum_{n,p,i} c_{npi} |a_n, b_p, i\rangle ,$$

Vamos assumir $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.

Se medirmos $\hat{A}$ e depois $\hat{B}$, qual a probabilidade de obter a_n e b_p, $\mathcal{P}(a_n, b_p)$?

$$|\psi\rangle \xrightarrow[\text{obtendo } \underline{\underline{a_n}}]{\text{medimos } \hat{A}} |\psi'_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_{p,i} |c_{npi}|^2}} \sum_{p,i} c_{npi} |a_n, b_p, i\rangle$$

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_{p,i} |c_{npi}|^2$$

medimos logo depois $\hat{B}$ obtendo $\underline{\underline{b_p}}$ com

$$\mathcal{P}_{a_n}(b_p) = \frac{\sum_i |c_{npi}|^2}{\sum_{p,i} |c_{npi}|^2}$$

$$|\psi''_{np}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_i |c_{npi}|^2}} \sum_i c_{npi} |a_n, b_p, i\rangle$$

Assim $\mathcal{P}(a_n, b_p) = \mathcal{P}(a_n) \times \mathcal{P}_{a_n}(b_p) = \sum_i |c_{npi}|^2$.

Mas e se medirmos primeiro $\hat{B}$ e só depois $\hat{A}$? Obteremos o mesmo resultado?

$$|\psi\rangle \xrightarrow[\text{obtendo } b_p]{\text{medimos } \hat{B}} |\psi'_p\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_{n,i}|c_{npi}|^2}} \sum_{n,i} c_{npi}|a_n, b_p, i\rangle$$

$$\mathcal{P}(b_p) = \sum_{n,i}|c_{npi}|^2$$

medimos logo depois $\hat{A}$ obtendo a_n com prob.

$$\mathcal{P}_{b_p}(a_n) = \frac{\sum_i |c_{npi}|^2}{\sum_{n,i}|c_{npi}|^2}$$

$$|\psi''_{pn}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_i |c_{npi}|^2}} \sum_i c_{npi}|a_n, b_p, i\rangle$$

Assim, $\mathcal{P}(b_p, a_n) = \mathcal{P}(b_p) \times \mathcal{P}_{b_p}(a_n) = \sum_i |c_{npi}|^2$ que é igual $\mathcal{P}(a_n, b_p)$. Note que $|\psi''_{np}\rangle = |\psi''_{pn}\rangle$.

↳ Concluímos que duas observáveis compatíveis podem ser medidas simultaneamente, pois ordem das medições é irrelevante.

↳ Medição de $\hat{A}$ não perturba medição de $\hat{B}$ e vice-versa.

Mas se $[\hat{A},\hat{B}] \neq 0$, i.e. $\hat{A}$ e $\hat{B}$ incompatíveis, isto não é mais verdade.

Por simplicidade consideremos $\mathcal{E}$ com dimensão 2. Como $[\hat{A},\hat{B}] \neq 0$ então não teremos base $\mathcal{E}$ de auto-estados comuns a $\hat{A}$ e $\hat{B}$.

$$\hat{A}|u_i\rangle = a_i|u_i\rangle \;, \text{ tal que } \{|u_1\rangle, |u_2\rangle\} \text{ são base ortonormada de } \mathcal{E}.$$

$$\hat{B}|v_i\rangle = b_i|v_i\rangle \;, \text{ tal que } \{|v_1\rangle, |v_2\rangle\} \text{ são base ortonormada de } \mathcal{E}.$$

Vamos assumir que

$$|u_1\rangle = \alpha|v_1\rangle + \beta|v_2\rangle \;,$$
$$|u_2\rangle = \beta^*|v_1\rangle - \alpha^*|v_2\rangle \;,$$

com $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Invertendo estas expressões

$$|v_1\rangle = \alpha^*|u_1\rangle + \beta|u_2\rangle \;,$$
$$|v_2\rangle = \beta^*|u_1\rangle - \alpha|u_2\rangle \;.$$

Então, se medirmos $\hat{A}$ e logo depois $\hat{B}$, qual $P(a_1, b_2)$? Comecemos com

$$|\psi\rangle = \gamma|u_1\rangle + \xi|u_2\rangle, \text{ onde } |\gamma|^2+|\xi|^2 = 1.$$

$$|\psi\rangle \xrightarrow[\text{obtendo } a_1]{\text{medimos } \hat{A}} |\psi'_{a_1}\rangle = |u_1\rangle = \alpha|v_1\rangle + \beta|v_2\rangle$$

$$\mathcal{P}(a_1) = |\gamma|^2$$

medição de $\hat{B}$
obtendo b_2

$$\mathcal{P}_{a_1}(b_2) = |\beta|^2$$

$$|\psi''_{a_1 b_2}\rangle = |v_2\rangle$$

e assim $\mathcal{P}(a_1, b_2) = \mathcal{P}(a_1) \times \mathcal{P}_{a_1}(b_2) = |\gamma|^2 \cdot |\beta|^2$

Medindo agora $\hat{B}$ e logo depois $\hat{A}$, partindo do mesmo estado $|\psi\rangle$, que temos que escrever na base $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle\}$

$$|\psi\rangle = \gamma|u_1\rangle + \xi|u_2\rangle = \underbrace{(\gamma\alpha + \xi\beta^*)}_{\tilde{\gamma}}|v_1\rangle + \underbrace{(\gamma\beta - \xi\alpha^*)}_{\tilde{\xi}}|v_2\rangle$$

Assim, temos

$$|\psi\rangle \xrightarrow[\text{obtendo } b_2]{\text{medindo } \hat{B}} |\psi'_{b_2}\rangle = |v_2\rangle = \beta^*|u_1\rangle - \alpha|u_2\rangle$$

$$\mathcal{P}(b_2) = |\tilde{\xi}|^2$$

medição de $\hat{A}$
obtendo a_1

$$\Big\downarrow \quad \mathcal{P}_{b_2}(a_1) = |\beta|^2$$

$$|\psi''_{b_2 a_1}\rangle = |u_1\rangle.$$

e assim $\mathcal{P}(b_2, a_1) = \mathcal{P}(b_2) \times \mathcal{P}_{b_2}(a_1) = |\tilde{\xi}|^2 |\beta|^2$

$= |\gamma\beta - \xi\alpha^*|^2 . |\beta|^2$ que é diferente de $\mathcal{P}(a_1, b_2)$.

Também estados finais diferentes $|\psi''_{a_1 b_2}\rangle$

$= |v_2\rangle \neq |u_1\rangle = |\psi''_{b_2 a_1}\rangle$.

Concluímos que a ordem de medição importa qd temos duas observáveis incompatíveis. Elas não podem ser medidas simultaneamente. Medir uma afecta a outra.

Teorema: A incompatibilidade de duas observáveis implica a impossibilidade de medir ambas com precisão arbitrária.

Demonstração: Consideremos $\hat{A}$ e $\hat{B}$ tal que

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i a \hat{\mathbb{1}} \qquad , \; a \in \mathbb{R}^+ .$$

Definimos $\hat{\alpha} \equiv \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \hat{\mathbb{1}}$ e $\hat{\beta} \equiv \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle \hat{\mathbb{1}}$ que são observáveis com $[\hat{\alpha}, \hat{\beta}] = [\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \hat{\mathbb{1}}, \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle \hat{\mathbb{1}}] =$
$= [\hat{A}, \hat{B}] = i a \hat{\mathbb{1}}$. Note também que $\langle \hat{\alpha} \rangle = 0 = \langle \hat{\beta} \rangle$ e

$$\Delta \alpha = \sqrt{\langle \hat{\alpha}^2 \rangle - \langle \hat{\alpha} \rangle^2} = \left[\langle \hat{A}^2 - 2\langle \hat{A} \rangle \hat{A} + \langle \hat{A} \rangle^2 \rangle - 0 \right]^{1/2}$$
$$= \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2} = \Delta A$$

$$\Delta \beta = \dots = \Delta B$$

Podemos então escrever

$\hat{\alpha} |\psi\rangle \equiv |\psi_1\rangle$

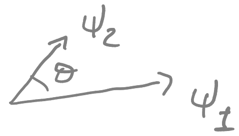
$$(\Delta \alpha)^2 = \langle \hat{\alpha}^2 \rangle = \langle \psi | \hat{\alpha}^2 | \psi \rangle = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle$$

$$(\Delta \beta)^2 = \langle \hat{\beta}^2 \rangle = \langle \psi | \hat{\beta}^2 | \psi \rangle = \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle$$

$\hat{\beta} |\psi\rangle \equiv |\psi_2\rangle$

Usando a desigualdade de Schwarz, podemos escrever

$$|(\psi_1, \psi_2)|^2 \leq \overbrace{(\psi_1, \psi_1)}^{= N_{\psi_1}^2} \overbrace{(\psi_2, \psi_2)}^{= N_{\psi_2}^2}$$



$(\psi_1, \psi_2) = |\psi_1| |\psi_2| \cdot \cos\theta$

$$(\Delta \alpha \Delta \beta)^2 = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle$$
$$\geq |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2 = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle$$
$$= \langle \psi | \hat{\alpha} \hat{\beta} | \psi \rangle \langle \psi | \hat{\beta} \hat{\alpha} | \psi \rangle$$

Como $[\hat{\alpha},\hat{\beta}] \neq 0 \implies (\hat{\alpha}\hat{\beta})^{+} = \hat{\beta}^{+}\hat{\alpha}^{+} = \hat{\beta}\hat{\alpha} \neq \hat{\alpha}\hat{\beta}$,
então teremos

$$\underbrace{\langle\psi|\hat{\alpha}.\hat{\beta}|\psi\rangle}_{\text{"} x+iy} = \langle\psi|(\alpha\beta)^{+}|\psi\rangle^{*} = \underbrace{\langle\psi|\hat{\beta}\hat{\alpha}|\psi\rangle^{*}}_{\overset{"}{x-iy}}$$

e assim podemos escrever

$$(\Delta\alpha\Delta\beta)^2 \geqslant x^2+y^2 \geqslant y^2 = -\frac{1}{4}\left(\langle\psi|\hat{\alpha}\hat{\beta}|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{\beta}\hat{\alpha}|\psi\rangle\right)^2$$

$$= -\frac{1}{4}\left(\langle\psi|\underbrace{[\hat{\alpha},\hat{\beta}]}_{\overset{"}{[\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle\mathbb{1},\, \hat{B}-\langle\hat{B}\rangle\mathbb{1}] = [\hat{A},\hat{B}] = ia\mathbb{1}}}|\psi\rangle\right)^2 = \frac{a^2}{4}$$

e finalmente concluimos que

$$\Delta\alpha\Delta\beta \geqslant \frac{a}{2} \implies \boxed{\Delta A.\Delta B \geqslant \frac{a}{2}}. \quad \square$$

5.5 Propriedades de evolução temporal do sistema quântico

A evolução temporal é governada pela eq. de Schrödinger

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

Propriedades:

(i) Determinismo na evolução temporal

↳ eq. Schr. é eq. de 1ª ordem em t. Então dado estado inicial $|\psi(t_0)\rangle$, todos os estados em $t \neq t_0$ estão totalmente determinados.

Nota: Indeterminismo em MQ está apenas associado ao colapso da f.o. equando de uma medição.

(ii) Princípio da sobreposição

Como eq. Schr. é linear podemos combinar soluções

$$|\psi(t_0)\rangle = \alpha_1 |\psi_1(t_0)\rangle + \alpha_2 |\psi_2(t_0)\rangle$$

e se $|\psi_1(t)\rangle$ e $|\psi_2(t)\rangle$ são solução da eq. Schr., então

$$|\psi(t)\rangle = \alpha_1 |\psi_1(t)\rangle + \alpha_2 |\psi_2(t)\rangle.$$

também é solução eq. Schr.

(iii) Conservação de probabilidade

A norma f.o. é constante na evolução

temporal, i.e. a probabilidade de encontrar partícula em qualquer ponto do espaço é sempre 1. Isto deve-se à hermiticidade do Hamiltoniano

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \left(\frac{d\langle\psi(t)|}{dt}\right)|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\left(\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}\right)$$

que se usarmos eq. Schr. e sua hermítica conjugada

$$\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \quad e \quad \frac{d}{dt}\langle\psi(t)| = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|\underbrace{\hat{H}^{+}(t)}_{=\hat{H}(t)}$$

então teremos

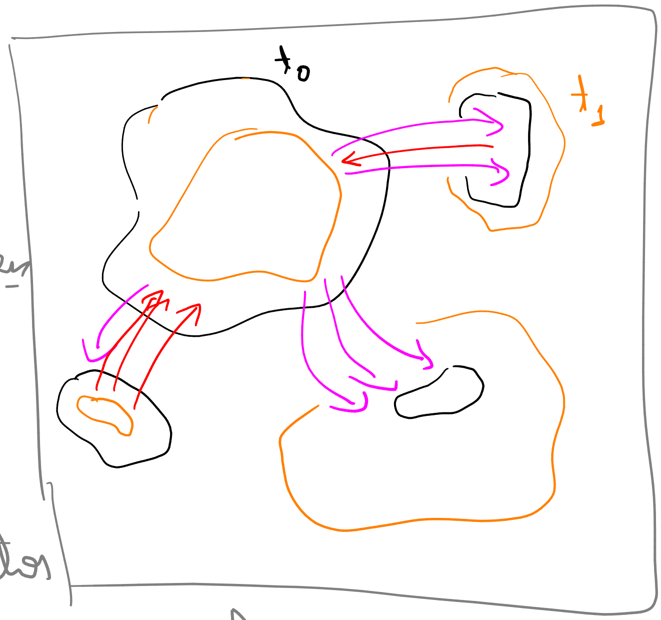
$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \cancel{-\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle} + \cancel{\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle}$$

$$= 0$$

□

Notemos no entanto que em geral teremos movimentos de densidade de probabilidade de umas regiões do espaço para outras à medida que o tempo avança (tal como um gás se move de umas regiões do espaço para outras).

Em algumas regiões do espaço a densidade de probabilidade aumenta (com o passar do tempo) e em outras diminui devido a esses movimentos de densidade de probabilidade.



Assumindo $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1$ temos que

$$\int_V \mathcal{P}(t,\vec{r})\, d^3\vec{r} = \int_V \psi^*(t,\vec{r})\,\psi(t,\vec{r})\, d^3\vec{r}$$

representa probabilidade da partícula estar no volume V. Podemos estudar a evol. temporal desta probabilidade

$$\frac{d}{dt}\int_V \mathcal{P}(t,\vec{r})\, d^3\vec{r} = \int_V \left[\left(\frac{\partial\psi^*(t,\vec{r})}{\partial t}\right)\psi(t,\vec{r}) + \psi^*(t,\vec{r})\left(\frac{\partial\psi(t,\vec{r})}{\partial t}\right)\right] d^3\vec{r}$$

$$= \int_V \left\{-\frac{1}{i\hbar}\,\psi(t,\vec{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + \cancel{V(\vec{r})}\right]\psi^*_{(t,\vec{r})} + \frac{1}{i\hbar}\,\psi^*(t,\vec{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + \cancel{V(\vec{r})}\right]\psi(t,\vec{r})\right\} d^3\vec{r}$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}\int_V \left[\psi(t,\vec{r})\,\vec{\nabla}^2\psi^*(t,\vec{r}) - \psi^*(t,\vec{r})\,\vec{\nabla}^2\psi(t,\vec{r})\right] d^3\vec{r}$$

que se definirmos corrente de densidade de probabilidade como

$$\vec{J} \equiv \frac{i\hbar}{2m}\left[\psi \vec{\nabla}\psi^* - \psi^* \vec{\nabla}\psi\right]$$

$\vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla} = \vec{\nabla}^2 = \Delta$

Podemos escrever então

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho(t,\vec{r})\, d^3\vec{r} = -\int_V \vec{\nabla}\cdot\vec{J}(t,\vec{r})$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho(t,\vec{r}) + \vec{\nabla}\cdot\vec{J}(t,\vec{r}) = 0}$$

↳ eqç de continuidade para a densidade de probabilidade.

Evolução da probabilidade de encontrar a partícula num volume V, resulta do fluxo de probabilidade para dentro desse volume (i.e. diferença entre densidade de probabilidade de que entra e densidade de probabilidade que sai do volume V).

↳ teorema de Gauss, $\int_V \vec{\nabla}\cdot\vec{F}\, d^3\vec{r} = \oint_S (\vec{F}\cdot\hat{n})\, dS^2$ permite-nos escrever forma integral desta eqç de continuidade

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho(t,\vec{r})\, d^3\vec{r} + \oiint (\vec{J}\cdot\hat{n})\, dS = 0$$