Formalismo II

Prof. Luiz T. F. Eleno

Departamento de Engenharia de Materiais
Escola de Engenharia de Lorena
Universidade de São Paulo

2019

Plano de aula

1. Interpretação estatística generalizada
   - Interpretação estatística generalizada
   - Sobreposição de estados
   - Função de onda no espaço do momento

2. Princípio da incerteza generalizado
   - Princípio da incerteza
   - Princípio da incerteza posição–momento
   - Princípio da incerteza energia–tempo

Plano de aula

1. Interpretação estatística generalizada
   - Interpretação estatística generalizada
   - Sobreposição de estados
   - Função de onda no espaço do momento

2. Princípio da incerteza generalizado
   - Princípio da incerteza
   - Princípio da incerteza posição–momento
   - Princípio da incerteza energia–tempo

Interpretação estatística generalizada

- Nas aulas anteriores, vimos como:
  1. calcular a probabilidade de uma partícula ser encontrada em determinada vizinhança
  2. determinar o valor esperado de qualquer quantidade observável
  3. encontrar os resultados possíveis de uma medida de energia e suas probabilidades
- A Interpretação Estatística Generalizada permite encontrar os resultados possíveis e suas respectivas probabilidades para a medida de **qualquer** observável
- Junto com a equação de Schrödinger, é um dos fundamentos da Mecânica Quântica

Interpretação estatística generalizada

Interpretação Estatística Generalizada:

- A medida de qualquer observável $Q(x,p)$ de uma partícula no estado $\Psi(x,t)$ resultará num dos **autovalores** do operador hermitiano $\hat{Q}(\hat{x},\hat{p})$ que o representa

Espectro discreto

- Se o espectro de $\hat{Q}$ é discreto, **a probabilidade de medir o valor do observável** Q e obter o autovalor q_n, associado à autofunção normalizada $f_n(x,t)$, é

$$c_n^* c_n = |c_n|^2$$

sendo que

$$c_n = \langle f_n \,|\, \Psi \rangle = \int f_n^*(x,t)\, \Psi(x,t)\, dx$$

- Lembre que a função de onda, na base completa formada pelas autofunções $\{ f_n \}$, é dada por

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n f_n(x,t)$$

e que

$$\langle f_n \,|\, f_m \rangle = \delta_{nm}$$

- Dizemos que, com a medida, a função de onda **colapsa** para o autoestado correspondente.

Exemplo: Energia e Hamiltoniano

- O operador que representa o observável energia E é o hamiltoniano $\hat{H}$, cujas autofunções $\Psi_n(x,t)$ são dadas por
$$\Psi_n(x,t) = \psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}$$
sendo $\psi_n(x)$ e E_n soluções da ESIT:
$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$$
- os **autovalores do operador hamiltoniano** são as energias E_n
- **na base das autofunções normalizadas do hamiltoniano,** a função de onda é
$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n\Psi_n(x,t) = \sum_n c_n\psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}$$
- Da interpretação estatística, **qualquer medida da energia resultará em um dos autovalores** E_n
- a probabilidade de uma medida da energia resultar no autovalor E_n é $|c_n|^2$
- **Ao realizar a medida** da energia, a autofunção $\Psi(x,t)$ **colapsa** para a autofunção $\Psi_n(x,t)$ correspondente à energia medida E_n

Valores esperados

- É claro que, para uma função de onda ortonormalizada $\Psi(x,t)$ descrita usando uma base de autofunções ortonormalizadas $f_n(x,t)$, é verdade que

$$\sum_n |c_n|^2 = 1$$

o que pode ser rapidamente verificado:

$$1 = \langle \Psi \mid \Psi \rangle = \left\langle \sum_n c_n f_n(x,t) \middle| \sum_m c_m f_m(x,t) \right\rangle = \sum_n \sum_m c_n^* c_m \langle f_n \mid f_m \rangle =$$

$$= \sum_n \sum_m c_n^* c_m \delta_{nm} = \sum_n c_n^* c_n = \sum_n |c_n|^2$$

- Da mesma maneira, o **valor esperado** para uma medida do observável Q é a média de todos os resultados possíveis q_n, cada um ponderado por sua probabilidade $|c_n|^2$, ou seja,

$$\langle Q \rangle = \sum_n |c_n|^2 q_n$$

- De fato,

$$\langle Q \rangle = \langle \Psi \mid \hat{Q}\Psi \rangle = \left\langle \sum_n c_n f_n \middle| \hat{Q} \sum_m c_m f_m \right\rangle = \sum_n \sum_m c_n^* c_m \langle f_n \mid \hat{Q} f_m \rangle =$$

$$= \sum_n \sum_m c_n^* c_m \langle f_n \mid q_m f_m \rangle = \sum_n \sum_m c_n^* c_m q_m \langle f_n \mid f_m \rangle = \sum_n \sum_m c_n^* c_m q_m \delta_{nm} = \sum_n c_n^* c_n q_n$$

Sobreposição de estados

Da interpretação estatística:

- **Sem realizar uma medição,** sabemos apenas (resolvendo a equação de Schrödinger para uma condição inicial conhecida) que a partícula tem uma função de onda $\Psi(x,t)$
- Conhecendo os autovalores q_n e as autofunções $f_n(x,t)$ de um observavel qualquer, sabemos que a função de onda pode ser escrita na base das autofunções:

$$\Psi(x,t) = \sum c_n f_n(x,t)$$

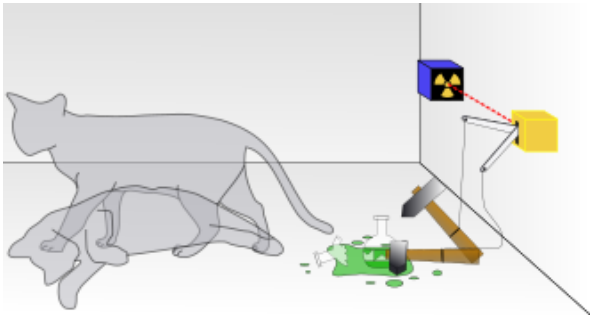
- **Antes de realizar a medição,** não sabemos o valor do observável: ele pode ser qualquer um dos seus autovalores!!!
- **Após a medição**, medimos um dos autovalores — ***mas não significa que a partícula estava naquele estado antes da medição!!!***
  - significa apena que, **antes da medição,** a partícula se encontrava em uma **sobreposição de estados**
  - **todos** os estados estavam representados na função de onda e tinham certa probabilidade $|c_n|^2$ de serem obtidos por uma medição
- É radicalmente diferente de qualquer coisa na Mecânica Clássica, caso em que podemos inferir que o valor medido era também o estado da partícula antes da medição!
  - *o exemplo mais famoso:* $\rightarrow$

Schrödingers Katze

Schrödingers Katze

„[...] Man kann auch ganz burleske Fälle konstruieren. Eine Katze wird in eine Stahlkammer gesperrt, zusammen mit folgender Höllenmaschine (die man gegen den direkten Zugriff der Katze sichern muß): in einem Geigerschen Zählrohr befindet sich eine winzige Menge radioaktiver Substanz, so wenig, daß im Laufe einer Stunde vielleicht eines von den Atomen zerfällt, ebenso wahrscheinlich aber auch keines; geschieht es, so spricht das Zählrohr an und betätigt über ein Relais ein Hämmerchen, das ein Kölbchen mit Blausäure zertrümmert. Hat man dieses ganze System eine Stunde lang sich selbst überlassen, so wird man sich sagen, daß die Katze noch lebt, wenn inzwischen kein Atom zerfallen ist. Der erste Atomzerfall würde sie vergiftet haben. Die Psi-Funktion des ganzen Systems würde das so zum Ausdruck bringen, daß in ihr die lebende und die tote Katze (s.v.v.) zu gleichen Teilen gemischt oder verschmiert sind.“

E. Schrödinger, *Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik.* Naturwissenschaften **23** (48) 807, 1935

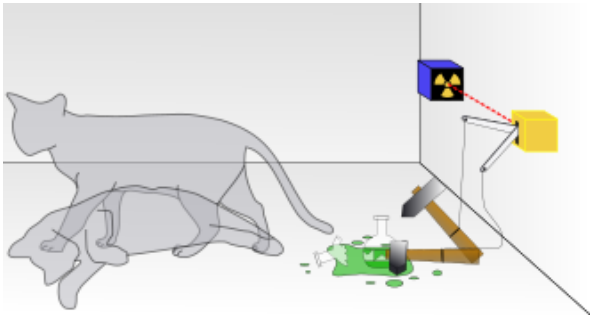


O gato de Schrödinger

O gato de Schrödinger

"(...) Pode-se também construir casos bastante cômicos. Um gato é trancado numa câmara de aço junto com o seguinte mecanismo diabólico (que deve ser protegido contra o acesso direto do gato): num contador Geiger há uma pequena quantidade de substância radioativa, em tão pouca quantidade que ao longo de uma hora talvez um único átomo decaia, mas, com igual probabilidade, pode ser que nenhum. Se acontecer, o contador responde e usa um relé para ativar um martelo que esmaga um pequeno frasco com ácido prússico [cianeto de hidrogênio, HCN]. Deixando todo o sistema isolado durante uma hora, o gato ainda estará vivo se nenhum átomo decaiu. Um único decaimento atômico o teria matado por envenenamento. A função–Psi de todo o sistema é tal que expressa essa situação como uma superposição do gato vivo e do gato morto (r.i.p.) em partes iguais juntas e misturadas."

E. Schrödinger, *A situação atual da mecânica quântica.* Ciências Naturais **23** (48) 807, 1935

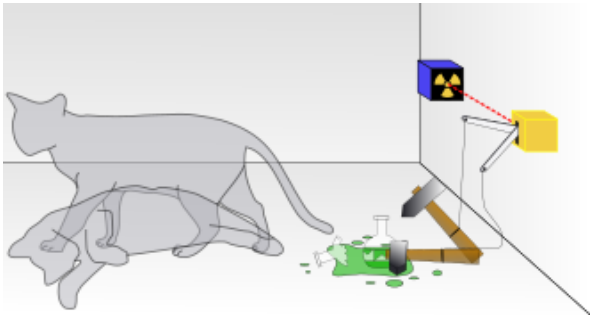


O gato de Schrödinger

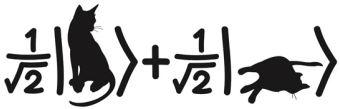
O gato de Schrödinger

"(...) Pode-se também construir casos bastante cômicos. Um gato é trancado numa câmara de aço junto com o seguinte mecanismo diabólico (que deve ser protegido contra o acesso direto do gato): num contador Geiger há uma pequena quantidade de substância radioativa, em tão pouca quantidade que ao longo de uma hora talvez um único átomo decaia, mas, com igual probabilidade, pode ser que nenhum. Se acontecer, o contador responde e usa um relé para ativar um martelo que esmaga um pequeno frasco com ácido prússico [cianeto de hidrogênio, HCN]. Deixando todo o sistema isolado durante uma hora, o gato ainda estará vivo se nenhum átomo decaiu. Um único decaimento atômico o teria matado por envenenamento. A função–Psi de todo o sistema é tal que expressa essa situação como uma superposição do gato vivo e do gato morto (r.i.p.) em partes iguais juntas e misturadas."

E. Schrödinger, *A situação atual da mecânica quântica.* Ciências Naturais **23** (48) 807, 1935



$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{\text{vivo}} + \Psi_{\text{morto}})$$



Exercício

Exercício

61. Um operador $\hat{A}$, representando o observável A, tem dois autoestados ψ_1 e ψ_2, com autovalores a_1 e a_2, respectivamente. O operador $\hat{B}$, representando o observável B, tem dois autoestados ϕ_1 e ϕ_2, com autovalores b_1 e b_2, respectivamente. Os autoestados estão relacionados por

$$\psi_1 = (3\phi_1 + 4\phi_2)/5, \qquad \psi_2 = (4\phi_1 - 3\phi_2)/5$$

(a) O observável A é medido, resultando no valor a_1. Qual é o estado do sistema (imediatamente) após a medição?
(b) Se B é então medido, quais são os resultados possíveis, e com quais probabilidades?
(c) Imediatamente após a medição de B, mede-se novamente A. Qual é a probabilidade de se obter a_1? (Veja que a resposta seria bastante diferente se você soubesse o valor da medição de B.)
(d) Qual seria a probabilidade de medir a_1 pela segunda vez, se o responsável pela medição esquecesse de medir o valor de B antes de repetir a medição de A?

Espectro contínuo

- tudo o que vimos anteriormente para observáveis com espectro discretos é também válido para espectros contínuos:

Espectro contínuo

- Se o espectro de um operador hermitiano $\hat{Z}$ é contínuo com autovalores z e autofunções ortonormalizadas de Dirac $f_z(x,t)$, a probabilidade de se medir um resultado no intervalo dz é

$$|c(z,t)|^2\, dz$$

sendo

$$c(z,t) = \langle f_z \,|\, \Psi \rangle = \int f_z^*(x,t)\, \Psi(x,t)\, dx$$

- A função de onda é uma sobreposição dos autoestados:

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(z,t)\, f_z(x,t)\, dz$$

- No ato da medição, a função de onda $\Psi(x,t)$ **colapsa** para o autoestado correspondente ao autovalor medido

Espaço do momento

- Em aula anterior, vimos que as autofunções do **operador momento**

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

são

$$f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

ao passo que os autovalores são qualquer (real) p. Com isso, podemos representar a função de onda no **espaço do momento** como

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} c_p \, f_p(x) \, dp$$

ou seja

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} c(p) \, e^{ipx/\hbar} \, dp$$

e $c(p)$ é dado por

$$c(p) = \langle f_p \,|\, \Psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar} \, \Psi(x,t) \, dx$$

Função de onda no espaço do momento

- O $c(p)$ do slide anterior é tão importante (em algumas aplicações) que tem um nome especial: **função de onda no espaço do momento,** $\Phi(p,t)$:

$$\boxed{\Phi(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,t) e^{-ipx/\hbar}\, dx}$$

- A função de onda $\Psi(x,t)$ é chamada de **função de onda no espaço da posição:**

$$\boxed{\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(p,t) e^{ipx/\hbar}\, dp}$$

- De acordo com a interpretação estatística, a probabilidade de uma medida do momento resultar no intervalo dp é

$$|\Phi(p,t)|^2\, dp$$

Exercício

62. Uma partícula de massa m está limitada ao poço função delta $V(x) = -\alpha\delta(x)$. Qual é a probabilidade de uma medição de seu momento produzir um valor maior do que $p_0 = m\alpha/\hbar$? A função de onda no espaço da posição para esse problema é

$$\Psi(x,t) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2}\, e^{-iEt/\hbar}$$

Solução

Solução

- Se a função de onda no espaço da posição é

$$\Psi(x,t) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2} e^{-iEt/\hbar},$$

$\Rightarrow$ a função de onda no espaço do momento é

$$\Phi(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-iEt/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2} e^{-ipx/\hbar}\, dx = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{p_0^{3/2}}{p^2+p_0^2} e^{-iEt/\hbar}$$

- A probabilidade pedida é então

$$\int_{p_0}^{+\infty} |\Phi(p,t)|^2\, dp = \frac{2}{\pi} p_0^3 \int_{p_0}^{+\infty} \left(\frac{1}{p^2+p_0^2}\right)^2 dp = \frac{1}{\pi}\left[\operatorname{arctg}\left(\frac{p}{p_0}\right) + \frac{p_0 p}{p^2+p_0^2}\right]\Bigg|_{p_0}^{\infty} =$$

$$= \frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi} \cong 0{,}0908\,.$$

- Obs: a probabilidade de que $p < -p_0$ é igual à probabilidade calculada acima. Portanto, a probabilidade de que $|p| > p_0$ é

$$2 \times \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi}\right) \cong 0{,}1817$$

□

Mais exercícios

Exercícios

63. Calcule a função de onda no espaço do momento $\Phi(p,t)$ para uma partícula no estado fundamental do oscilador harmônico. Qual é a probabilidade (com dois algarismos significativos) de uma medida de p em uma partícula nesse estado resultar em um valor fora do intervalo permitido pela física clássica (para a mesma energia)?

64. Mostre que

$$\langle x \rangle = \int \Phi^* \left(+i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) \Phi \, dp$$

Dicas: observe que

$$x e^{ipx/\hbar} = -i\hbar \frac{d}{dp} \left(e^{ipx/\hbar} \right)$$

e use o Ex. 60 (ver última aula).

- *Comentário:* no espaço do momento, o operador posição $\hat{x}$ é

$$\hat{x} = +i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$$

Assim, de forma mais geral:

$$\langle Q(x,p) \rangle = \begin{cases} \int \Psi^* \hat{Q} \left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx = \langle \Psi \,|\, \hat{Q}\Psi \rangle \,, & \text{no espaço da posição} \\ \int \Phi^* \hat{Q} \left(+i\hbar \frac{\partial}{\partial p}, p \right) \Phi dp = \langle \Phi \,|\, \hat{Q}\Phi \rangle \,, & \text{no espaço do momento} \end{cases}$$

$\Rightarrow$ em princípio, pode-se fazer todos os cálculos no espaço da posição ou no espaço do momento (embora nem sempre seja fácil!)

Plano de aula

1 Interpretação estatística generalizada
- Interpretação estatística generalizada
- Sobreposição de estados
- Função de onda no espaço do momento

2 Princípio da incerteza generalizado
- Princípio da incerteza
- Princípio da incerteza posição–momento
- Princípio da incerteza energia–tempo

Princípio da incerteza generalizado

- Vimos na 1ª aula que o **Princípio da Incerteza de Heisenberg** é escrito como

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

  sendo σ_x a incerteza na posição e σ_p a incerteza no momento de uma partícula
- Vamos agora deduzir o **Princípio da Incerteza Generalizado,** do qual o Princípio da Incerteza de Heisenberg é um *caso particular*

Teorema 1.

Princípio da incerteza generalizado: *Se A e B são dois observáveis, vale a desigualdade*

$$\boxed{\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right)^2}$$

sendo que

$$\boxed{[\hat{A}, B] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}$$

é o ***comutador*** *(ou parêntese de Poisson) dos operadores (hermitianos) $\hat{A}$ e $\hat{B}$ que representam os observáveis A e B, respectivamente.*

Demonstração.

Veremos a seguir. □

Princípio da incerteza generalizado (Demonstração — parte I)

- Inicialmente, precisamos demonstrar a **Desigualdade de Schwarz**

Teorema 2.

- ***Desigualdade de Schwarz:*** *para quaisquer funções $f(x)$ e $g(x)$ no espaço de Hilbert:*

$$\boxed{|\langle f\,|\,g\rangle|^2 \leq \langle f\,|\,f\rangle\,\langle g\,|\,g\rangle}$$

Demonstração.

- Seja $h(x) = f(x) + \lambda g(x)$, sendo λ qualquer número complexo. Calcule agora

$$\begin{aligned}\langle h\,|\,h\rangle &= \langle f+\lambda g\,|\,f+\lambda g\rangle = \langle f\,|\,f\rangle + \langle f\,|\,\lambda g\rangle + \langle \lambda g\,|\,f\rangle + \langle \lambda g\,|\,\lambda g\rangle \\ &= \langle f\,|\,f\rangle + \lambda\,\langle f\,|\,g\rangle + \lambda^*\,\langle g\,|\,f\rangle + \lambda^*\lambda\,\langle g\,|\,g\rangle\end{aligned}$$

- Por definição, $\langle h\,|\,h\rangle \geq 0$ e a equação vale para qualquer λ — em particular, vale para

$$\lambda = -\frac{\langle g\,|\,f\rangle}{\langle g\,|\,g\rangle}$$

- Então (lembre que $\langle f|g\rangle = \langle g|f\rangle^*$):

$$\langle h\,|\,h\rangle = \langle f\,|\,f\rangle - \cancel{\frac{\langle g\,|\,f\rangle}{\langle g\,|\,g\rangle}\langle f\,|\,g\rangle} - \frac{\langle g\,|\,f\rangle^*}{\langle g\,|\,g\rangle}\langle g\,|\,f\rangle + \cancel{\frac{\langle g\,|\,f\rangle^*}{\langle g\,|\,g\rangle}\frac{\langle g\,|\,f\rangle}{\langle g\,|\,g\rangle}\langle g\,|\,g\rangle} \geq 0$$

$$\langle f\,|\,f\rangle - \frac{|\langle f\,|\,g\rangle|^2}{\langle g\,|\,g\rangle} \geq 0 \qquad \Rightarrow \qquad |\langle f\,|\,g\rangle|^2 \leq \langle f\,|\,f\rangle\,\langle g\,|\,g\rangle$$

□

Princípio da incerteza generalizado (Demonstração — parte II)

- Vamos considerar agora dois **observáveis**, A e B, representados pelos **operadores hermitianos** $\hat{A}$ e $\hat{B}$, respectivamente
- Lembrete: a variância no valor esperado de A é

$$\sigma_A^2 = \left\langle (A - \langle A \rangle)^2 \right\rangle = \left\langle \Psi \,\middle|\, (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \Psi \right\rangle$$

- Como $\hat{A}$ é hermitiano:

$$\sigma_A^2 = \left\langle (\hat{A} - \langle A \rangle)\Psi \,\middle|\, (\hat{A} - \langle A \rangle)\Psi \right\rangle$$

- Da mesma forma,

$$\sigma_B^2 = \left\langle (\hat{B} - \langle B \rangle)\Psi \,\middle|\, (\hat{B} - \langle B \rangle)\Psi \right\rangle$$

- Se definimos

$$f = (\hat{A} - \langle A \rangle)\Psi$$
$$g = (\hat{B} - \langle B \rangle)\Psi$$

teremos

$$\sigma_A^2 = \langle f \,|\, f \rangle$$
$$\sigma_B^2 = \langle g \,|\, g \rangle$$

- Usando a Desigualdade de Schwarz:

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 = \langle f \,|\, f \rangle \langle g \,|\, g \rangle \geq \langle f \,|\, g \rangle^2$$

- Precisamos agora achar um limite para $|\langle f | g \rangle|^2$

Princípio da incerteza generalizado (Demonstração — parte III)

- Do slide anterior,

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq |\langle f \,|\, g \rangle|^2$$

- Para qualquer número complexo z, é verdade que

$$|z|^2 = (\mathrm{Re}\, z)^2 + (\mathrm{Im}\, z)^2 \geq (\mathrm{Im}\, z)^2$$

- Mas, também é verdade que

$$\mathrm{Re}\, z = \frac{z + z^*}{2}$$

$$\mathrm{Im}\, z = \frac{z - z^*}{2i}$$

- Portanto

$$|z|^2 \geq \left(\frac{z - z^*}{2i} \right)^2$$

- $\Rightarrow$ se $z = \langle f \,|\, g \rangle$:

$$|\langle f \,|\, g \rangle|^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \left[\langle f \,|\, g \rangle - \langle g \,|\, f \rangle \right] \right)^2$$

  e portanto

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \left[\langle f \,|\, g \rangle - \langle g \,|\, f \rangle \right] \right)^2$$

- vamos agora calcular $\langle f | g \rangle$ e $\langle g | f \rangle$

Princípio da incerteza generalizado (Demonstração — parte IV)

- Vamos calcular $\langle f|g\rangle$ usando a sua definição:

$$\langle f|g\rangle = \left\langle (\hat{A} - \langle A\rangle)\Psi \,\middle|\, (\hat{B} - \langle B\rangle)\Psi \right\rangle$$

$$\langle f|g\rangle = \left\langle \hat{A}\Psi \,\middle|\, \hat{B}\Psi \right\rangle - \langle B\rangle \left\langle \hat{A}\Psi \,\middle|\, \Psi \right\rangle - \langle A\rangle \left\langle \Psi \,\middle|\, \hat{B}\Psi \right\rangle + \langle A\rangle \langle B\rangle \langle \Psi \,|\, \Psi\rangle$$

Use as relações

$$\left\langle \hat{A}\Psi \,\middle|\, \Psi \right\rangle = \left\langle \Psi \,\middle|\, \hat{A}\Psi \right\rangle = \langle A\rangle$$

$$\left\langle \hat{B}\Psi \,\middle|\, \Psi \right\rangle = \left\langle \Psi \,\middle|\, \hat{B}\Psi \right\rangle = \langle B\rangle$$

$$\langle \Psi \,|\, \Psi\rangle = 1$$

e reescreva:

$$\langle f|g\rangle = \left\langle \hat{A}\Psi \,\middle|\, \hat{B}\Psi \right\rangle - \langle B\rangle \langle A\rangle - \langle A\rangle \langle B\rangle + \langle A\rangle \langle B\rangle$$

ou seja,

$$\langle f|g\rangle = \left\langle \hat{A}\Psi \,\middle|\, \hat{B}\Psi \right\rangle - \langle A\rangle \langle B\rangle$$

- Analogamente,

$$\langle g|f\rangle = \left\langle \hat{B}\Psi \,\middle|\, \hat{A}\Psi \right\rangle - \langle A\rangle \langle B\rangle$$

Princípio da incerteza generalizado (Demonstração — parte V)

- Do slide anterior,

$$\langle f|g\rangle = \langle \hat{A}\Psi \,|\, \hat{B}\Psi\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$$
$$\langle g|f\rangle = \langle \hat{B}\Psi \,|\, \hat{A}\Psi\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$$

- Mas veja que, como $\hat{A}$ e $\hat{B}$ são hermitianos,

$$\langle \hat{A}\Psi \,|\, \hat{B}\Psi\rangle = \langle \Psi \,|\, \hat{A}\hat{B}\Psi\rangle = \langle \hat{A}\hat{B}\rangle$$

$$\langle \hat{B}\Psi \,|\, \hat{A}\Psi\rangle = \langle \Psi \,|\, \hat{B}\hat{A}\Psi\rangle = \langle \hat{B}\hat{A}\rangle$$

- Então:

$$\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle = \langle \hat{A}\hat{B}\rangle - \langle \hat{B}\hat{A}\rangle = \langle \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\rangle$$

ou seja,

$$\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle = \langle [\hat{A}, \hat{B}]\rangle$$

e chegamos finalmente ao Princípio da incerteza generalizado:

$$\boxed{\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle [\hat{A}, \hat{B}]\rangle\right)^2}$$

□

Exercício

Exercício

65. *(Princípio da incerteza expandido)* Como acabamos de ver, o princípio da incerteza generalizado afirma que

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \frac{1}{4} \langle C \rangle^2$$

sendo $\hat{C} = -i \left[\hat{A}, \hat{B}\right]$.

(a) Demonstre que a desigualdade pode ser reforçada:

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \frac{1}{4} \left(\langle C \rangle^2 + \langle D \rangle^2 \right)$$

sendo $\hat{D} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} - 2 \langle A \rangle \langle B \rangle$.

(b) Teste o princípio da incerteza expandido para o caso $B = A$, em que $\hat{C} = 0$ (veja que o princípio expandido não ajuda muito...).

(c) E para o caso $B = 2A$?

Princípio da incerteza posição–momento

- Princípio da incerteza generalizado:

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right)^2$$

- Vamos ver um exemplo:
  - operador posição:

$$\hat{A} = \hat{x} = x$$

  - operador momento

$$\hat{B} = \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

- Na aula sobre o oscilador harmônico, vimos que

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

  (e é claro então que $\langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle = i\hbar$)
- Portanto:

$$\sigma_x^2 \sigma_p^2 \geq \left(\frac{1}{2i} i\hbar \right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2$$

  ou seja,

$$\boxed{\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}}$$

  exatamente como visto na 1ª aula!
- Veja então que o princípio da incerteza **não** é uma suposição *extra*, e sim uma **consequência** da interpretação estatística!

Exercícios

Exercícios

66. Demonstre as seguintes identidades entre comutadores:
    (a) $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$
    (b) $[x^n, \hat{p}] = i\hbar n x^{n-1}$
    (c) para qualquer função $f(x)$,
    $$[f(x), \hat{p}] = i\hbar \frac{df}{dx}$$
    (d) $[\hat{x}, \hat{p}^2] = 2i\hbar\hat{p}$

67. Demonstre o princípio da incerteza posição–energia:
    $$\sigma_x \sigma_E \geq \frac{\hbar}{2m} |\langle p \rangle|$$
    sendo σ_E o desvio padrão do valor esperado do operador hamiltoniano,
    $$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V$$
    Dica: use o Ex. 66.

68. Mostre que, se dois operadores $\hat{P}$ e $\hat{Q}$ não comutam, isto é, se $[\hat{P}, \hat{Q}] \neq 0$, eles não podem ter o mesmo conjunto completo de autofunções — ou seja, eles não poder ter as mesmas autofunções. *Dica:* demonstre que, se $\hat{P}$ e $\hat{Q}$ têm as mesmas autofunções, então eles devem necessariamente comutar: $[\hat{P}, \hat{Q}]f = 0$ para qualquer função f no espaço de Hilbert.

Princípio da incerteza energia–tempo

- É comum encontrar o princípio da incerteza posição-momento escrito na forma

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

- Geralmente, encontramos também um **Princípio da Incerteza Energia-Tempo** escrito na forma

$$\Delta E \, \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

  - Incertezas na posição, no momento e na energia são intuitivamente claras: representam o grau de imprecisão no conhecimento de onde, de quão rápida e de quanta energia está ou tem a partícula
- Mas o que significa Δt, ou seja, uma *incerteza no tempo*?
  - Afinal, não há como medir o tempo de uma partícula: não existe tal coisa (tempo é uma variável independente — a não ser no contexto relativístico!)
  - veremos em breve que Δt é um **intervalo de tempo necessário para alterar *significativamente* o estado do sistema** (o que *significaticamente* quer dizer ficará mais claro em breve)

Taxa de variação de valores esperados

- Para avaliar o quão rapidamente o estado do sistema está mudando, vamos calcular a taxa temporal de variação do valor esperado de qualquer observável Q:

$$\frac{d\langle Q\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\langle\Psi\,|\,\hat{Q}\Psi\rangle = \left\langle\frac{\partial\Psi}{\partial t}\,\middle|\,\hat{Q}\Psi\right\rangle + \left\langle\Psi\,\middle|\,\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\Psi\right\rangle + \left\langle\Psi\,\middle|\,\hat{Q}\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right\rangle$$

- (para quase todos os observáveis Q importantes — mas não *todos* — $\partial\hat{Q}/\partial t = 0$)
- Mas a equação de Schrödinger diz que

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$$

- Então:

$$\frac{d\langle Q\rangle}{dt} = -\frac{1}{i\hbar}\langle\hat{H}\Psi\,|\,\hat{Q}\Psi\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\Psi\,|\,\hat{Q}\hat{H}\Psi\rangle$$

- Como $\hat{H}$ e $\hat{Q}$ são hermitianos:

$$\frac{d\langle Q\rangle}{dt} = -\frac{1}{i\hbar}\langle\Psi\,|\,\hat{H}\hat{Q}\Psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\Psi\,|\,\hat{Q}\hat{H}\Psi\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\right\rangle$$

ou

$$\frac{d\langle Q\rangle}{dt} = -\frac{1}{i\hbar}\langle\Psi\,|\,(\hat{H}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{H})\Psi\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\right\rangle$$

Taxa de variação de valores esperados

- Do último slide:

$$\frac{d\langle Q\rangle}{dt} = -\frac{1}{i\hbar}\langle\Psi\,|\,(\hat{H}\hat{Q}-\hat{Q}\hat{H})\Psi\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\right\rangle$$

- Portanto:

$$\frac{d\langle Q\rangle}{dt} = -\frac{1}{i\hbar}\langle\Psi\,|\,[\hat{H},\hat{Q}]\,\Psi\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\right\rangle$$

ou seja,

$$\boxed{\frac{d\langle Q\rangle}{dt} = -\frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{H},\hat{Q}]\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\right\rangle}$$

- Repare que, se $\hat{H}$ e $\hat{Q}$ comutam ($[\hat{H},\hat{Q}]=0$) e se $\hat{Q}$ não depende explicitamente do tempo ($\partial\hat{Q}/\partial t = 0$) $\Rightarrow \langle Q\rangle$ é constante e, portanto, Q é uma grandeza *conservada*

Exercício

69. Use a equação acima para os casos específicos em que
    (a) $\hat{Q} = 1$
    (b) $\hat{Q} = \hat{H}$
    (c) $\hat{Q} = x$
    (d) $\hat{Q} = \hat{p}$

Princípio da Incerteza Energia-Tempo

- Usando a equação

$$\frac{d\langle Q\rangle}{dt} = -\frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{H},\hat{Q}]\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\right\rangle,$$

relembrando o Princípio da Incerteza generalizado

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right)^2,$$

fazendo $\hat{A} = \hat{H}$ e $\hat{B} = \hat{Q}$ e considerando que $\hat{Q}$ não depende explicitamente de t, teremos

$$\sigma_H^2\sigma_Q^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle[\hat{H},\hat{Q}]\rangle\right)^2 = \left(\frac{1}{2i}\frac{\hbar}{i}\frac{d\langle Q\rangle}{dt}\right)^2$$

ou simplesmente

$$\boxed{\sigma_H\sigma_Q \geq \frac{\hbar}{2}\left|\frac{d\langle Q\rangle}{dt}\right|}$$

- Definindo $\Delta E = \sigma_H$ e Δt por

$$\boxed{\Delta t = \frac{\sigma_Q}{|d\langle Q\rangle/dt|}}$$

então

$$\boxed{\Delta E\Delta t \geq \frac{\hbar}{2}}$$

que é o *Princípio da Incerteza Energia-Tempo*

Princípio da Incerteza Energia-Tempo

- Veja que, no Princípio da Incerteza Energia-Tempo

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

temos

$$\Delta t = \frac{\sigma_Q}{|d\langle Q\rangle/dt|}$$

ou seja,

$$\sigma_Q = \left|\frac{d\langle Q\rangle}{dt}\right| \Delta t$$

- $\Rightarrow$ **Δt é o intervalo de tempo para o observável Q mudar de um desvio-padrão**
  - um desvio padrão é uma mudança *significativa*
- Veja que Δt *depende de qual observável Q se usa*
  - a mudança pode ser rápida para um observável e lenta para outro
- Por outro lado:
  - Se ΔE é pequeno $\Rightarrow$ a taxa de mudança de *todos* os observáveis deve ser bem gradual
  - Se *qualquer* observável muda rapidamente $\Rightarrow$ a incerteza na energia deve ser grande

Exercícios

70. Refaça o Ex. 67 da pág. 25 usando o princípio da incerteza energia-tempo.

Mais exercícios

Exercícios

71. Mostre que, para o n-ésimo estado estacionário do oscilador harmônico, $\sigma_x \sigma_p = (2n+1)\hbar/2$.
72. Teste o princípio da incerteza tempo-energia para a função de onda e o observável x no n-ésimo estado do oscilador harmônico, calculando σ_H, σ_x e $d\langle x\rangle/dt$ de forma exata. *Dica:* veja o exemplo 2.5 do Griffiths.
73. Use a equação para a taxa de variação do valor esperado de um observável para mostrar que

$$\frac{d}{dt}\langle xp\rangle = 2\langle T\rangle - \left\langle x\frac{dV}{dx}\right\rangle$$

onde T é a energia cinética ($H = T + V$). Num estado *estacionário* o lado esquerdo é zero (por quê?) e portanto

$$2\langle T\rangle = \left\langle x\frac{dV}{dx}\right\rangle$$

que é conhecido como **Teorema do Virial**. Use-o para provar que $\langle T\rangle = \langle V\rangle$ para estados estacionários do oscilador harmônico.

74. Numa versão interessante do princípio da incerteza tempo-energia, $\Delta t = \tau/\pi$, sendo τ o tempo que $\Psi(x,t)$ leva para evoluir a um estado ortogonal a $\Psi(x,0)$. Teste tal afirmação usando uma função de onda que é uma mistura homogênea de dois estados estacionários ortonormais de algum potencial arbitrário, ou seja, $\Psi(x,0) = (1/\sqrt{2})[\psi_1(x) + \psi_2(x)]$.