Campos conservativos

$$\begin{cases} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\psi_E(\vec{r}) = E\,\psi_E(\vec{r}) \\ \Psi_E(\vec{r},t) = \psi_E(\vec{r})\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \end{cases} \Longrightarrow \text{autoestados da energia} \begin{cases} |\Psi_E(\vec{r},t)|^2 = |\psi_E(\vec{r})|^2 = \rho(\vec{r}) \ \text{(estacionário)} \\ \langle E\rangle = E \ \text{(energia definida)} \\ \Delta E = 0 \end{cases}$$

superposição de autoestados: $\Psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n \underbrace{\Psi_n(\vec{r},t)}_{\text{autoestados normalizados}} = \sum_n \underbrace{c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}}_{c_n(t)}\psi_n(\vec{r})$ onde $\begin{cases} H\psi_n = E_n\psi_n \\ c_n = \int \psi_e(\vec{r})\,\Psi(\vec{r},0)\,d^3r \\ c_n^* = \int \psi_e^*(\vec{r})\,\Psi^*(\vec{r},0)\,d^3r \end{cases}$

$$\begin{cases} |\Psi(\vec{r},t)|^2 = \rho(\vec{r},t) \ \text{(não-estacionário)} \\ P(E_n) = |c_n(t)|^2 = |c_n|^2 \ \text{(não depende do tempo)} \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} \langle E\rangle = \sum_n P(E_n)E_n = \sum_n |c_n|^2 E_n \Rightarrow \boxed{\frac{d\langle E\rangle}{dt} = 0} \\ \Delta E \neq 0 \ \text{(energia não-definida)} \end{cases}$$

→ probabilidade associada ao autoestado Ψ_E

$$\begin{cases} H\Psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n H\Psi_n(\vec{r},t) = \sum_n c_n E_n \Psi_n(\vec{r},t) \\ \int \Psi^*(\vec{r},t)\left[H\Psi(\vec{r},t)\right]dV = \sum_{e,n} c_e^* c_n E_n \underbrace{\int \Psi_e^*(\vec{r},t)\Psi_n(\vec{r},t)\,dV}_{\delta_{en}} = \sum_n |c_n|^2 E_n = \langle E\rangle \end{cases}$$

$$\boxed{\langle E\rangle = \int \Psi^*(\vec{r},t)\left[H\Psi(\vec{r},t)\right]dV = (\Psi, H\Psi)}$$

$\boxed{\text{Valores médios e incertezas da energia não dependem do tempo em um campo conservativo}}$

Operadores (energia e momentum linear)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar{r})\right]\psi(\bar{r}) = E\psi(\bar{r})$$ auto estado de energia

$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar{r})}$ operador hamiltoniano (H)

$$\boxed{H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar{r})} = \frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m} + V(\bar{r})$$

$H \Rightarrow$ energia

$\frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m} \Rightarrow$ energia cinética $\Rightarrow \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \boxed{\bar{p} = -i\hbar\vec{\nabla}}$ (Operador momentum linear)

$V(\bar{r}) \Rightarrow$ energia potencial

$$\begin{cases} H = \dfrac{p^2}{2m} + V(\bar{r}) \\ \bar{p} = -i\hbar\vec{\nabla} \Rightarrow \begin{cases} p_x = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x} \\ p_y = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial y} \\ p_z = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial z} \end{cases} \end{cases}$$

valor médio (real): $\boxed{\langle p_x\rangle = \int \psi^*(\bar{r},t)\, p_x\, \psi(\bar{r},t)\, dV = -i\hbar\int \psi^*(\bar{r},t)\frac{\partial\psi(\bar{r},t)}{\partial x}\, dV}$

Regras de comutação e incertezas

operadores de posição e momentum
$$\begin{cases} x \\ p_x = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial x} \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} x\,(p_x\psi) = -i\hbar x \dfrac{\partial \psi}{\partial x} \\ p_x\,(x\psi) = -i\hbar\psi - i\hbar x\dfrac{\partial\psi}{\partial x} \end{cases} \Longrightarrow \underbrace{x\,(p_x\psi) - p_x\,(x\psi)}_{(x p_x)\psi - (p_x x)\psi} = i\hbar\psi$$

$$= \underbrace{(x p_x - p_x x)}_{[x, p_x]}\psi$$

$\Downarrow$

grandezas não-compatíveis $\boxed{[x, p_x] = i\hbar}$

$$[x,x] = [x, p_y] = [x, p_z] = [y, p_x] = [z, p_x] = [p_x, p_x] = [x,y] = [x,z] = 0$$

$$[y,z] = [y,z] = [z,z] = [p_y, p_y] = [p_y, p_z] = [p_y, p_y] = [p_z, p_z] = 0 \qquad [y, p_y] = [z, p_z] = i\hbar$$

$$\boxed{[x_k, p_l] = i\hbar\,\delta_{k,l}}$$

incertezas
$$\begin{cases} (\Delta x)^2 = \displaystyle\int \psi^* (\overbrace{x - \langle x\rangle}^{x'})^2 \psi \, dx \\ (\Delta p_x)^2 = \displaystyle\int \psi^* (\underbrace{p_x - \langle p_x\rangle}_{p'_x})^2 \psi \, dx \end{cases} \qquad [x', p'_x] = [x, p_x] = i\hbar$$

(reais)

~~Seja~~
$$\begin{cases} \psi' = (x' + i\alpha\, p'_x)\psi \qquad (\alpha - \text{real}) \\ \psi'^* = (x' - i\alpha\, p'^*_x)\psi^* \qquad p'^*_x = p^*_x - \langle p_x\rangle = -p_x - \langle p_x\rangle \end{cases}$$

$$\int |\psi'|^2 dx = \int (x' - i\alpha\, p_x'^{*})\psi^* \psi' \, dx = \int \psi^* (x' + i\alpha\langle p_x\rangle)\psi' dx + \underbrace{i\alpha \int \psi' (\overset{-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}}{p_x \psi^*})\, dx}_{-i\alpha \int \psi^* (p_x \psi')\, dx} \geq 0$$

$$= \int \psi^* [x' - i\alpha(\overbrace{p_x - \langle p_x\rangle}^{p_x'})]\psi' dx = \int \psi^* (x' - i\alpha\, p_x')(x' + i\alpha\, p_x')\psi\, dx \geq 0$$

$$= \underbrace{\int \psi^* x'^2 \psi\, dx}_{(\Delta x)^2} + i\alpha \int \psi^* \underbrace{(x' p_x' - p_x' x)}_{[x;\, p_x'] = i\hbar} \psi\, dx + \alpha^2 \underbrace{\int \psi^* p_x'^2 \psi\, dx}_{(\Delta p_x)^2} \geq 0$$

$$(\Delta p_x)^2 \alpha^2 - \hbar\alpha + (\Delta x)^2 \geq 0 \implies \hbar^2 - 4(\Delta x)^2 (\Delta p_x)^2 \leq 0 \implies \boxed{\Delta x\, \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}}$$

relação de incerteza de Heisenberg

$$\begin{cases} \Delta x\, \Delta p_x \geq \hbar/2 \\ \Delta y\, \Delta p_y \geq \hbar/2 \\ \Delta z\, \Delta p_z \geq \hbar/2 \end{cases}$$

correlações entre as incertezas associadas a observáveis que não comutam (não-compatíveis) (grandezas)

- Mecânica Clássica, Eletromagnetismo e Relatividade descrevem os fenômenos naturais de maneira causal e determinística.

- Mecânica Quântica adota uma abordagem probabilística, causal e não-determinística.

causalidade → a partir de um estado inicial (Ψ_0), a eq. de Schrödinger permite a determinação de um estado final $[\Psi(\vec{r}, t)]$.

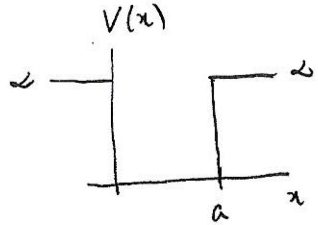
não-determinismo → valores das grandezas associadas a um sistema são aleatórios.

- a descrição probabilística não é apenas questão de ignorância (das condições iniciais) ou praticidade (sistemas c/ muitos graus de liberdade), mas sim uma característica intrínseca da evolução ou descrição dos fenômenos ou sistemas físicos (mesmo aqueles c/ poucos graus de liberdade, como uma partícula).

- Enquanto o princípio da Relatividade e a invariância de c (veloc. da luz no vácuo) constituem as hipóteses fundamentais da Relatividade Restrita, o princípio da Incerteza e a constante de Planck são os elementos fundamentais da Mec. Quântica

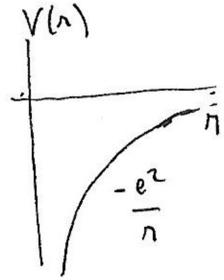
Relações de incerteza e estimativas ($\Delta p \, \Delta x \geq \hbar/2$)

• poço infinito:



$$\Delta x_{máx} \sim a \Rightarrow \Delta p_{min} \sim \frac{\hbar}{a} \Rightarrow E_{min} \simeq \frac{(\Delta p_{min})^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

• átomo de hidrogênio: $\Delta p_{min} \sim \hbar / r$, $r \sim$ raio atômico

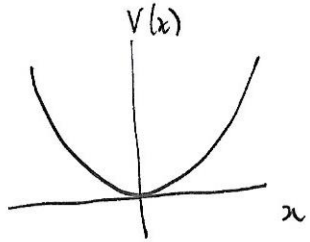


$$E = -\frac{e^2}{r} + \frac{(\Delta p_{min})^2}{2m} = -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2mr^2}$$

$$\left.\frac{dE}{dr}\right|_{a_B} = \frac{e^2}{a_B^2} - \frac{\hbar^2}{m a_B^3} = 0$$

$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} \simeq 0{,}529$ Å (raio de Bohr) $\Rightarrow \boxed{E_{min} = \frac{-e^2}{2a_B} \simeq -13{,}6\,eV}$

• oscilador harmônico:



$$E = \frac{1}{2} m \omega^2 (\Delta x)^2 + \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{1}{2} m \omega^2 (\Delta x)^2 + \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2}$$

$$\frac{dE}{d(\Delta x)} = m\omega^2 \Delta x - \frac{\hbar^2}{4m} \frac{1}{(\Delta x)^3} = 0 \Rightarrow (\Delta x)^4 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2$$

$$(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$E_{min} = \frac{1}{4}\hbar\omega + \frac{1}{4}\hbar\omega = \boxed{\frac{\hbar\omega}{2} = E_{min}}$$

Princípio da Incerteza de Heisenberg

Em algumas circunstâncias, o estado de uma partícula pode ser caracterizado por um conjunto de medidas de grandezas independentes.

Segundo o princípio de Heisenberg, grandezas não independentes não podem ser simultaneamente definidas e, portanto, não podem caracterizar o estado da partícula.

O princípio da Incerteza de Heisenberg é, usualmente, expresso em termos das dispersões dos possíveis valores (medidas) de duas grandezas cujas medições não são independentes.

A dispersão das medidas de uma grandeza é caracterizada pelo desvio padrão em relação ao valor médio, chamada de <u>incerteza</u>.

As incertezas da posição e do momentum de uma partícula ao longo da direção x são correlacionadas de tal maneira que satisfazem à relação de Heisenberg.

$$\boxed{\Delta x \, \Delta p_x \geq \hbar/2}$$

Na formulação de Schrödinger, a não independência de duas grandezas e a relação de Heisenberg resultam da não comutatividade dos operadores que as representam.

$$\boxed{[x, p_x] = i\hbar}$$

A denominação incerteza leva a enunciados do princípio de Heisenberg como

- não se pode conhecer simultaneamente a posição e o momentum de uma partícula.
- não se pode medir simultaneamente a posição e o momentum de uma partícula.
- é impossível conhecer com exatidão a posição e o momentum de uma partícula.

Apesar de se referir à dispersão das possíveis medidas de uma grandeza, a incerteza quântica não ~~traduz~~ se refere ao desconhecimento do "valor exato" da grandeza, ☆ mas sim à própria existência desse "valor exato", ~~e não~~ ou ao fato de se poder ou não medir a grandeza em questão, ☆

O exemplo típico de ~~uma~~ grandeza que não pode ser definida é o comprimento de onda, o qual só é definido se a amplitude de onda variar ao longo do espaço de forma harmônica indefinidamente (perfil ilimitado).

Para um perfil limitado, a incerteza não traduz um desconhecimento do "verdadeiro valor do comprimento de onda", ele simplesmente não existe.