Capítulo 2

Mecânica Quântica

Notas de Física

Johny Carvalho Silva – johny@johnycarvalho.com

Teoremas, Exercícios Resolvidos

Niterói, RJ – Brasil, 2015 | www.johnycarvalho.com

2.1 Conjunto de Observáveis Comutantes

Teorema 2.1.1 *Se dois operadores A e B, hermitianos, comutam e se $|\psi\rangle$ é um autovalor de A, então $(B|\psi\rangle)$ também é autovalor de A com o mesmo autovalor.*

Demonstração

$$\begin{aligned}
A|\psi\rangle &= a|\psi\rangle \\
&\quad \text{aplicando } B \text{ em ambos os lados} \\
BA|\psi\rangle &= Ba|\psi\rangle \\
&= aB|\psi\rangle \\
&\quad \text{usando o fato de } A \text{ e } B \text{ comutam } AB = BA \\
A(B|\psi\rangle) &= a(B|\psi\rangle)
\end{aligned}$$

■

Teorema 2.1.2 *Se dois observáveis A e B comutam e $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ são autovetores A, com diferentes autovalores, então:*

$$\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle = 0$$

Demonstração

$$\begin{aligned}
\langle\psi_1|[A,B]|\psi_2\rangle &= 0 \\
\langle\psi_1|AB - BA|\psi_2\rangle &= \\
\langle\psi_1|AB|\psi_2\rangle - \langle\psi_1|BA|\psi_2\rangle &=
\end{aligned}$$

$$\text{temos que,} \begin{cases} A|\psi_1\rangle = a_1|\psi_1\rangle \\ \\ A|\psi_2\rangle = a_2|\psi_2\rangle \end{cases}$$

e, ainda, A é hermitiano, $\langle\psi|A = \lambda\langle\psi|$, então

$$\begin{aligned} a_1\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle - a_2\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle &= 0 \\ \underbrace{(a_1 - a_2)}_{a_1 \neq a_2 \quad \text{pois } |\psi_1\rangle \text{ e } |\psi_2\rangle \text{ são autovetores de } A.}\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle &= \end{aligned}$$

Com isto,

$$\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle = 0$$

■

Teorema 2.1.3 *Se dois observáveis A e B comutam, pode-se construir uma base ortonormal do espaço de estados com autovetores comum à A e B.*

Demonstração

Caso discreto por simplicidade. Seja $\{|u_n^i\rangle\}$ o conunto de autovetores de A com degenerescência q_n.

2.2 Exercícios Resolvidos

2.2.1 - Demonstrar a desigualdade de Schwartz

$$\langle\xi|\xi\rangle\,\langle\phi|\phi\rangle \geqslant |\langle\xi|\phi\rangle|^2$$

Demonstração

Se $|\xi\rangle = |0\rangle$ e $|\phi\rangle = |0\rangle$ temos $\langle\xi|\xi\rangle = \langle\phi|\phi\rangle = \langle\xi|\phi\rangle = 0$ que é a solução trivial. Por outro lado, dado $|\xi\rangle$ e $|\phi\rangle$ não nulos e as constantes a e b pertencentes a $\mathbb{C}$, podemos calcular a norma $\langle a\xi + b\phi|a\xi + b\phi\rangle$.

$$\begin{aligned} 0 &\leqslant \langle a\xi + b\phi|a\xi + b\phi\rangle \\ &\leqslant \langle a\xi|a\xi\rangle + \langle a\xi|b\phi\rangle + \langle b\phi|a\xi\rangle + \langle b\phi|b\phi\rangle \\ &\leqslant a^*a\,\langle\xi|\xi\rangle + a^*b\,\langle\xi|\phi\rangle + b^*a\,\langle\phi|\xi\rangle + b^*b\,\langle\phi|\phi\rangle \end{aligned} \tag{2.1}$$

como a e b em (2.1) são constantes arbitrárias, podemos fazer $\langle\xi|\xi\rangle = b$ e $\langle\xi|\phi\rangle = -a$. Com isto, temos

$$\begin{aligned} 0 &\leqslant a^*ab - a^*ba - b^*aa + b^*b\,\langle\phi|\phi\rangle \\ &\leqslant -a^*a + b\,\langle\phi|\phi\rangle \\ &\leqslant -\langle\xi|\phi\rangle^*\,\langle\xi|\phi\rangle + \langle\xi|\xi\rangle\,\langle\phi|\phi\rangle \\ &\leqslant -|\langle\xi|\phi\rangle|^2 + \langle\xi|\xi\rangle\,\langle\phi|\phi\rangle \\ |\langle\xi|\phi\rangle|^2 &\leqslant \langle\xi|\xi\rangle\,\langle\phi|\phi\rangle \end{aligned} \tag{2.2}$$

ou ainda,

$$\langle \xi | \xi \rangle \langle \phi | \phi \rangle \geqslant |\langle \xi | \phi \rangle|^2 \tag{2.3}$$

■

2.2.2 - Demonstrar a relação de incerteza entre dois operadores, $\hat{A}$ e $\hat{B}$, a saber:

$$\Delta A \Delta B \geqslant \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|,$$
$$\text{onde } \Delta A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2} \text{ e } \Delta B = \sqrt{\langle \hat{B}^2 \rangle - \langle \hat{B} \rangle^2} \tag{2.4}$$

Demonstração

Sejam $\hat{A}$ e $\hat{B}$ operadores hermitianos e $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$ dois autoestados tais que

$$|\psi_A\rangle = \left(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle\right) |\psi\rangle \tag{2.5a}$$

$$|\psi_B\rangle = \left(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle\right) |\psi\rangle \tag{2.5b}$$

multiplicando (2.5a) por $\langle \psi_A |$

$$\begin{aligned} \langle \psi_A | \psi_A \rangle &= \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^\dagger (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) | \psi \rangle \\ &= (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^\dagger (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \langle \psi | \psi \rangle \end{aligned} \tag{2.6}$$

Em (2.6) temos $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, normalizado, e $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ e $\hat{B}^\dagger = \hat{B}$, hermitianos, então

$$\begin{aligned} \langle \psi_A | \psi_A \rangle &= (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 = \hat{A}^2 + \langle \hat{A} \rangle^2 - 2\hat{A}\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle + \langle \hat{A} \rangle^2 - 2\langle \hat{A} \langle \hat{A} \rangle \rangle \\ &= \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \end{aligned} \tag{2.7}$$

onde $\langle \hat{A} \langle \hat{A} \rangle \rangle = \langle \hat{A} \rangle^2$.

Procedendo de modo análogo com (2.5b) obteremos

$$\langle \psi_B | \psi_B \rangle = \langle \hat{B}^2 \rangle - \langle \hat{B} \rangle^2. \tag{2.8}$$

Combinando (2.4), (2.7) e (2.8) obtemos

$$(\Delta A)^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 = \langle \psi_A | \psi_A \rangle \tag{2.9a}$$

$$(\Delta B)^2 = \langle \hat{B}^2 \rangle - \langle \hat{B} \rangle^2 = \langle \psi_B | \psi_B \rangle \tag{2.9b}$$

Vamos agora usar a desigualdade de Schwartz

$$\langle \psi_A | \psi_A \rangle \langle \psi_B | \psi_B \rangle \geqslant |\langle \psi_A | \psi_B \rangle|^2 \tag{2.10}$$

e a seguinte propriedade dos números complexos

$$|z|^2 = Im^2(z) + Re^2(z) \geqslant Im^2(z) = \left[\frac{1}{2i}(z - z^*)\right]^2 \tag{2.11}$$

para obtermos

$$|\langle \psi_A | \psi_B \rangle|^2 \geqslant \left[\frac{1}{2i} \left(\langle \psi_A | \psi_B \rangle - \langle \psi_B | \psi_A \rangle\right)\right]^2. \tag{2.12}$$

Calculando (2.12)

$$\begin{aligned}
\langle\psi_{A}\,|\psi_{B}\rangle &= \langle\psi|\,(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)^{\dagger}(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle)\,|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|\,(\hat{A}^{\dagger}-\langle\hat{A}^{\dagger}\rangle)(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle)\,|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|\,\hat{A}^{\dagger}\hat{B}-\hat{A}^{\dagger}\langle\hat{B}\rangle-\langle\hat{A}^{\dagger}\rangle\hat{B}+\langle\hat{A}^{\dagger}\rangle\langle\hat{B}\rangle\,|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|\,\hat{A}^{\dagger}\hat{B}\,|\psi\rangle-\langle\psi|\,\hat{A}^{\dagger}\langle\hat{B}\rangle\,|\psi\rangle-\langle\psi|\,\langle\hat{A}^{\dagger}\rangle\hat{B}\,|\psi\rangle+\langle\psi|\,\langle\hat{A}^{\dagger}\rangle\langle\hat{B}\rangle\,|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|\,\hat{A}^{\dagger}\hat{B}\,|\psi\rangle-\langle\hat{B}\rangle\,\langle\psi|\,\hat{A}^{\dagger}\,|\psi\rangle-\langle\hat{A}^{\dagger}\rangle\,\langle\psi|\,\hat{B}\,|\psi\rangle+\langle\hat{A}^{\dagger}\rangle\langle\hat{B}\rangle\,\langle\psi|\,\psi\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle\psi_{B}\,|\psi_{A}\rangle &= \langle\psi|\,(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle)^{\dagger}(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)\,|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|\,(\hat{B}^{\dagger}-\langle\hat{B}^{\dagger}\rangle)(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)\,|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|\,\hat{B}^{\dagger}\hat{A}-\hat{B}^{\dagger}\langle\hat{A}\rangle-\langle\hat{B}^{\dagger}\rangle\hat{A}+\langle\hat{B}^{\dagger}\rangle\langle\hat{A}\rangle\,|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|\,\hat{B}^{\dagger}\hat{A}\,|\psi\rangle-\langle\psi|\,\hat{B}^{\dagger}\langle\hat{A}\rangle\,|\psi\rangle-\langle\psi|\,\langle\hat{B}^{\dagger}\rangle\hat{A}\,|\psi\rangle+\langle\psi|\,\langle\hat{B}^{\dagger}\rangle\langle\hat{A}\rangle\,|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|\,\hat{B}^{\dagger}\hat{A}\,|\psi\rangle-\langle\hat{A}\rangle\,\langle\psi|\,\hat{B}^{\dagger}\,|\psi\rangle-\langle\hat{B}^{\dagger}\rangle\,\langle\psi|\,\hat{A}\,|\psi\rangle+\langle\hat{B}^{\dagger}\rangle\langle\hat{A}\rangle\,\langle\psi|\,\psi\rangle
\end{aligned}$$

lembrando que $\hat{A}$ e $\hat{B}$ são hermitianos e $\langle\psi|\,\psi\rangle = 1$

$$\langle\psi_{A}\,|\psi_{B}\rangle - \langle\psi_{B}\,|\psi_{A}\rangle = \langle\psi|\,\hat{A}\hat{B}\,|\psi\rangle - \langle\psi|\,\hat{B}\hat{A}\,|\psi\rangle = \langle\psi|\,[\hat{A},\hat{B}]\,|\psi\rangle \tag{2.13}$$

De (2.12) e (2.13) temos

$$|\langle\psi_{A}\,|\psi_{B}\rangle|^{2} \geqslant \left[\frac{1}{2i}\Big(\langle\psi|\,[\hat{A},\hat{B}]\,|\psi\rangle\Big)\right]^{2}. \tag{2.14}$$

O valor esperado de $\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle$ é dado por

$$\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle = \frac{\langle\psi|\,[\hat{A},\hat{B}]\,|\psi\rangle}{\langle\psi|\,\psi\rangle}. \tag{2.15}$$

Assim, podemos reescrever (2.14) usando (2.15), (2.10) e (2.9) e obtermos

$$\Delta A \Delta B \geqslant \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right|.$$

■

2.2.3 - No espaço euclidiano o produto interno (v_1, v_2) satisfaz

1. $(sv_1, v_2) = s^*\,(v_1, v_2)$
2. $(v_1 + v_2, v_3) = (v_1, v_3) + (v_2, v_3)$

Demonstre essas propriedades.

Demonstração

- *Propriedade do produto interno complexo:* dados os vetores v_1, v_2 e v_3 e um número s qualquer pertencente a $\mathbb{C}$, temos

i. $(v_1, v_1) \geqslant 0$ e $v_1 \cdot v_1 = 0$ se, e somente se, $v_1 = 0$

ii. $(v_1, v_2) = (v_2, v_1)^*$

iii. $(v_1, sv_2) = s(v_1, v_2)$

iv. $(v_1, v_2 + v_3) = (v_1, v_2) + (v_1, v_3)$

Então,

1. $(sv_1, v_2) \overset{(ii)}{=} (v_2, sv_1)^* = [(v_2, sv_1)]^* \overset{(iii)}{=} [s\,(v_2, v_1)]^* = s^*\,(v_2, v_1)^* = s^*\,(v_1, v_2)$

2. $(v_1 + v_2, v_3) \overset{(ii)}{=} (v_3, v_1 + v_2)^* \overset{(iv)}{=} (v_3, v_1)^* + (v_3, v_2)^* = (v_1, v_3) + (v_2, v_3)$

$\blacksquare$