Aula 15

17 de maio de 2020

6. Fundamentos da Mecânica Quântica

6.1 Introdução

Neste bloco conectamos todos os conceitos matemáticos estudados nas últimas semanas, na construção de uma formulação concisa da teoria quântica. Isso é feito de forma axiomática, através de postulados, motivados por razões físicas. Esses postulados conectam as observações empíricas da natureza com os objetos matemáticos usados para descrevê-la, fornecendo uma prescrição matemática de como usar a teoria para predizer e analisar os resultados de experimentos.

Na literatura da área, os postulados são apresentados de várias formas, dependendo do contexto e da área de aplicação. Podem também ser expressos em termos de **vetores de estado** ou usando o **operador densidade**. Discutiremos aqui ambas as formas, fazendo ainda referências à descrição dos vetores de estado em em termos de **funções de ondas**, para que percebam as conexões e relações entre essas diferentes representações do sistema físico.

Essas diferentes formas, em geral, são totalmente equivalentes e muitas vezes a escolha é uma questão de preferência, ou familiaridade com o formalismo. Há, porém, situações em que uma ou outra pode ser mais vantajosa e conveniente. Discutiremos, por exemplo, casos onde a descrição com o operador densidade é conveniente para tratar sistemas quânticos abertos, e introduziremos uma forma alternativa de descrever a dinâmica quântica.

Para concentrar-se nas ideias principais, toda a discussão aqui será para sistemas isolados (sistemas fechados) de uma única partícula quântica. Estudaremos as extensões necessárias mais adiante, ao falar de sistema de partículas e fazer uma breve introdução às ideias de sistemas quânticos abertos.

6.2 Postulados

Por razões didáticas, os postulados serão primeiro apresentados em termos de vetores de estado, aproveitando a linguagem introduzida nas últimas aulas.

Para focar a atenção nos pontos principais, apresento-os primeiro de forma compacta e resumida. Concentre-se na ideia e objetivo principal de *cada um deles*.

Postulados resumidos da mecânica quântica

1. O *estado de um sistema* físico é descrito pelo **vetor de estado** $|\psi\rangle$ do seu espaço de Hilbert.
2. Medidas de **observáveis** físicos são representas por *operadores Hermitianos*.
3. Os possíveis *resultados de uma medida* são **autovalores** do operador correspondente.
4. As **probabilidades** dos resultados são dados pelo *Regra de Born*.
5. O **estado pós medida** é um vetor do *subespaço dos **autovetores*** correspondente ao resultado medido.
6. A **evolução temporal** do vetor de estado é governada pela equação de Schrödinger ou pela equação de Heisenbrg.

Depois discutiremos com mais detalhe suas implicações, nuances e extensões (para descrições alternativas) nas seções seguintes. Veremos também vários exemplos nas aulas.

Postulado 1: estados de um sistema físico

Vetores de estado

O estado num instante de tempo t_o é descrito por um vetor $|\psi(t_o)\rangle$ pertencente a um espaço de Hilbert complexo, $\mathcal{H}$.

Se o conjunto $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \ldots, |u_n\rangle\}$ forma uma base de um espaço finito $\mathcal{H}$, o estado $|\psi\rangle$ pode ser escrito como:

$$|\psi\rangle = c_1|u_1\rangle + c_2|u_2\rangle + \cdots + c_n|u_n\rangle = \sum_{i=1}^{n} c_i|u_i\rangle$$

onde os coeficientes da expansão são números complexos dados por

$$c_i = \langle u_i|\psi\rangle,$$

sempre satisfazendo a condição de normalização $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, para ser consistente com a inerpretação de Born. A condição de normalização exige que

$$\langle\psi|\psi\rangle = |c_1|^2 + |c_2|^2 + \cdots + |c_n|^2 = \sum_i |c_i|^2 = 1.$$

Postulado 2: observáveis físicos

Observáveis são operadores Hermitianos

Quantidades físicas mensuráveis, como energia e momento linear são chamados de observáveis físicos . Matematicamente, esses observáveis são descritos por operadores Hermitianos que atuam em vetores do espaço de Hilbert.

Os autovetores desses operadores formam uma base ortonormal do espaço de estados do sistema.

Dada uma base $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \ldots, |u_n\rangle\}$, qualquer operador pode ser escrito na forma de produtos externos dessa base, segundo:

$$\hat{A} = \sum_{i,j=1}^{n} A_{ij} |u_i\rangle \langle u_j| ,$$

onde

$$A_{ij} = \langle u_i| A |u_j\rangle ,$$

para que o operador seja Hermitiano, devemos ter $A_{ij} = A^*_{ji}$.

Decomposição Espectral

Um *operador normal* sempre pode ser escrito em termos de operadores de projeção formados pelos seus próprios autovetores . Isso é chamado de *decomposição espectral*.

Suponha um operador $\hat{A}$ com autovalores λ_i e autovetores $|a_i\rangle$:

$$\hat{A} |a_i\rangle = \lambda_i |a_i\rangle$$

A sua decomposição espectral é a representação na forma diagonal, em termos de seus autovalores e autovetores, conforme:

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i |a_i\rangle \langle a_i| .$$

Postulado 3: resultados de medidas físicas

Resultados de uma medida

Os possíveis resultados de uma medida de um observável físico são autovalores de seus operador correspondente.

De acordo com o postulado, esses são os únicos valores possíveis da medida.

A seguir discutimos como calcular as probabilidades de cada uma dessas medidas e como fica o estado do sistema após o processo de medida. O processo de medida é um dos pontos críticos na teoria quântica, havendo debates até hoje quando a sua completa interpretação.

Neste primeiro contato com o conteúdo é preferível concentrar a atenção no tipo mais comum e conhecido, denominadas de **medidas projetivas**, devido ao tratamento introduzido por John von Neumann[1], e que são expressas em termos de operadores de projeção. A discussão abaixo deixará mais claro a razão do nome.

Medidas projetivas não não são as únicas formas de medidas na mecânica quântica, mas são as mais simples de entender e, para fixar as ideias, nos concentraremos nelas aqui.

Postulado 4 : interpretação probabilística

Probabilidades dos resultados

A probabilidade de medir um resultado λ_i, (autovalor) associado a um autovetor $|a_i\rangle$ de observável $\hat{A}$, é dada pela regra de Born.

Se o estado $|\psi\rangle$ for expandido na base dos autovetores $|a_i\rangle$ do operador $\hat{A}$

$$|\psi\rangle = \alpha_1|a_1\rangle + \alpha_2|a_2\rangle + \cdots + \alpha_n|a_n\rangle = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i|a_i\rangle$$

$$\text{A probabilidade de obter o resultado } \lambda_i : \quad \mathcal{P}_{\lambda_i} = |\langle a_i|\,\psi\rangle|^2 = |\alpha_i|^2.$$

Lembrando-se que o produto interno é um número complexo, cujo produto é comutativo, podemos reescrever

$$|\langle a_i|\,\psi\rangle|^2 = \langle a_i|\,\psi\rangle(\langle a_i|\,\psi\rangle)^* = \langle a_i|\,\psi\rangle\,\langle\psi|\,a_i\rangle$$
$$\langle a_i|\,\psi\rangle\,\langle\psi|\,a_i\rangle = \langle\psi|\,a_i\rangle\,\langle a_i|\,\psi\rangle = \langle\psi|\hat{P}_i|\psi\rangle\,.$$

onde $\hat{P}_i$ é o operador projetor $\hat{P}_i = |a_i\rangle\,\langle a_i|$.

Degenerescência

Suponha que o operador $\hat{A}$ tem autovalores degenerados, λ_m, correspondendo ao autovetores $\{|a_m^1\rangle, |a_m^2\rangle, ..., |a_m^{g_m}\rangle\}$, onde

$$\hat{A}\left|a_m^k\right\rangle = \lambda_m \left|a_m^k\right\rangle, \quad k = 1, 2, \ldots, g_m.$$

O conjunto $\{\left|a_m^k\right\rangle\}$ constitui um subespaço $\mathcal{M}$ do espaço de Hilbert $\mathcal{H}$.

No caso de degenerescência, a probabilidade de obter o resultado λ_m é encontrado somando sobre os produtos internos de todos os autovetores do subespaço $\mathcal{M}$.

$$\mathcal{P}_m = \sum_{k=1}^{g_m} \left|\left\langle a_m^k \middle| \psi\right\rangle\right|^2.$$

Postulado 5: estado após uma medida

Considerando apenas medidas projetivas, vamos dividir esta exposição em duas partes: (i) *sem* e (ii) *com* degenerescência.

Estado *posterior* em medidas projetivas

(i) Caso não degenerado:

se o resultado for um autovalor não degenerado λ_i, do operador $\hat{A}$ observável, teremos que imediatamente após a medida o estado $|\psi_i\rangle$ do sistema é dado pelo vetor projetado no autovetor correspondente ao autovalor medido.

Se o estado antes da medida for dado por

$$|\psi\rangle = \alpha_1|a_1\rangle + \alpha_2|a_2\rangle + \cdots + \alpha_n|a_n\rangle$$

onde $\{|a_i\rangle\}$ é uma base ortonormal formada pelos autovetores de $\hat{A}$, tal que $\hat{A}\,|a_i\rangle = \lambda_i\,|a_i\rangle$.

Supondo que a medida resultou no valor λ_i, o estado imediatamente após a medida é dado por:

$$|\psi\rangle \rightarrow \quad |\psi_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi|P_i|\psi\rangle}}\,\hat{P}_i\,|\psi\rangle$$

onde $\hat{P}_i$ é o projetor $\hat{P}_i = |a_i\rangle\,\langle a_i|$.

(ii) Caso degenerado:

se o resultado for um autovalor degenerado λ_m, do operador $\hat{A}$, teremos que imediatamente após a medida o estado $|\psi_m\rangle$ do sistema é o estado projetado no subespaço $\mathcal{M}$ dos autovetores correspondentes ao autovalor medido.

Se o estado $|\psi\rangle$ antes da medida for representado na base dos autovalores do observável, onde $\{|a_m^k\rangle\}$ é um conjunto formado pelos autovetores correspondes ao autovalor λ_m, tal que $\hat{A}\,|a_m^k\rangle = \lambda_k\,|a_m^k\rangle$.

Supondo que a medida resultou no valor λ_i, o estado imediatamente após a medida é dado por:

$$|\psi\rangle \rightarrow \quad |\psi_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi|P_m|\psi\rangle}}\,\hat{P}_m\,|\psi\rangle$$

onde $\hat{P}_m$ é o projetor no subespaço $\mathcal{M}$

$$\hat{P}_m = \sum_{k=1}^{g_m} |a_m^k\rangle\,\langle a_m^k|\,.$$

Note que no caso degenerado, após se observar o resultado da medida λ_m, com degenerescência g_m, tudo que podemos dizer é que o estado posterior à medida é uma superposição (combinação linear) dos autovetores correspondentes ao autovalor λ_m.

Postulado 6: evolução dinâmica do sistema

Dinâmica de um sistema quântico

Schrödinger Picture:

A evolução temporal de um sistema quântico fechado é governada pela equação de Schrödinger.

Assim, sendo $|\psi(t_o)\rangle$ o estado inicial, no instante de tempo t_o, o estado do sistema num instante t posterior, $|\psi(t)\rangle$, pode ser derterminado a partir da equação

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(t)\rangle = \hat{H}\,|\psi(t_o)\rangle$$

onde $\hat{H}$ é o operador Hamiltoniano. Para um sistema isolado com Hamiltoniano independente do tempo, podemos integrar a equação anterrior, para obter

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_o)\right)|\psi(t_o)\rangle$$

onde temos a exponencial do operador Hamiltoniano, como visto na aula anterior.

O termo exponencial pode ser entendido como um operador de evolução temporal , unitário, denotado $\hat{U}$

$$\hat{U}(t, t_o) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t - t_o)\right)$$

que evolui (propaga no tempo) o vetor de estado $|\psi(t_o)\rangle \to |\psi(t)\rangle$, tal que

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_o)\,|\psi(t_o)\rangle\,.$$

Heisenberg Picture :

Na representação de Schrödinger, o operador de evolução temporal evolui o vetor de estado do sistema. Uma representação alternativa, é a representação de Heisenberg, onde os vetores de estados são transformados por operadores que evoluem no tempo. Essas duas representações são completamente equivalentes, pois as predições da mecânica quântica são determinadas por produtos internos

$$\langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t_o)|\hat{U}^\dagger\hat{A}\,\hat{U}|\psi(t_o)\rangle$$

Pode-se descrever a evolução temporal do sistema em termos de um operador

$$\hat{A}(t) = \hat{U}^\dagger\hat{A}(t_o)\,\hat{U}$$

Neste caso, a dinâmica do sistema é dada pela equação de Heisenberg

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

onde $[\hat{A}, \hat{H}]$ é o comutador do observável $\hat{A}$ e o Hamiltoniano $\hat{H}$.

...