Aula 1 - SFI5905

Sérgio R.Muniz - IFSC/USP
25 de março de 2021

Fundamentos da Mecânica Quântica

Introdução

Nesta semana conectamos os conceitos matemáticos abstratos da álgebra, sugeridos como leitura da última semana e discutidos nas aulas desta semana, numa formulação concisa da teoria quântica. Isso será feito de forma axiomática, através de postulados, que são motivados por razões físicas e observações empíricas. Esses postulados, portanto, conectam as observações empíricas da natureza com os objetos matemáticos usados para descrevê-la, fornecendo uma prescrição matemática precisa de como usar a teoria para *prever* 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. Podendo, por exemplo, ser expressos em termos de **vetores de estado** ou usando o **operador densidade**. Neste curso, discutiremos ambas as formas, fazendo (eventualmente) ainda referências à descrição em termos de **funções de ondas**, que normalmente é a forma apresentada nos cursos introdutórios de MQ, para que percebam as conexões e relações entre essas diferentes representações.

Essas diferentes formas, em geral, são equivalentes e a escolha às vezes é uma questão de preferência ou familiaridade com o formalismo. Há, porém, situações em que uma pode ser mais vantajosa e conveniente que outra. 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, ou conservativos) de uma única partícula quântica. Estudaremos as extensões necessárias nas próximas aulas, ao falar de sistema de várias partículas e fazer uma breve introdução às ideias de sistemas quânticos abertos.

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.

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

Postulado 1: estados de um sistema físico

Vetores de estado

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

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, e os autovalores estão associados aos valores que podem ser medidos.

Dada uma base $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \ldots, |u_n\rangle\}$, qualquer operador em $\mathcal{H}$ pode ser escrito na forma de produtos externos (*projetores*) dos vetores dessa base, segundo:

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

onde

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

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

• Decomposição Espectral

Um *operador normal* sempre pode ser escrito em termos de projetores dos seus próprios autovetores. Isso é chamado de *decomposição espectral*.

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

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

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

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

A forma diagonal é bastante conveniente e útil em muitas situações, porém não é a única forma de representar um operador. Deve-se lembrar que um operador (observável ou não) pode ser representado de diferentes formas, em diferentes bases, todas equivalente e relacionadas por transformações lineares em $\mathcal{H}$.

Atenção: Nem todos os operadores em $\mathcal{H}$ são observáveis.

Postulado 3: resultados de medidas físicas

Resultados possíveis

Os possíveis resultados de uma medida de um observável físico são *sempre* autovalores do operador correspondente. *Esses são os únicos resultados possíveis dessa medida.*

A seguir veremos 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, com debates até hoje quando à sua interpretação. Ideias e experimentos que surgiram (e continuam surgindo) no contexto de *informação quântica* têm contribuído para avançar a compreensão sobre esse tema, mas não há (ainda) uma explicação satisfatória sobre esse ponto. Apesar disso, não há nenhum debate sobre os resultados esperados ou obtidos, que são os mesmo, independente da interpretação dada ao processo de medida.

Neste primeiro contato com o conteúdo é preferível concentrar a atenção no tipo mais comum e conhecido de medida, denominada de **medida projetiva**, devido ao tratamento introduzido por John von Neumann, e que é expresso em termos de operadores de projeção (daí o nome). A discussão abaixo deixará mais claro a razão do nome.

Medidas projetivas, porém, não são as únicas formas de medidas na mecânica quântica. Mas elas são as mais simples de entender e, por razões didáticas: *para fixar primeiro as ideias principais*, nos concentraremos nelas aqui.

Postulado 4 : interpretação probabilística

Probabilidades dos resultados

A probabilidade de medir um resultado λ_i, (autovalor) associado a um autovetor $|a_i\rangle$ do 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 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 $\hat{P}_i = |a_i\rangle\,\langle a_i|$.

Assim, para a medida de valor λ_i, podemos interpretar $\mathcal{P}_{\lambda_i} = |\alpha_i|^2$ como o valor esperado do operador projetor $\hat{P}_i$ no estado $|\psi\rangle$. Daí a designação: *medida projetiva*.

- **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

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

Neste caso, 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 $\mathcal{M}$.

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

Postulado 5: estado após uma medida

Estado após uma medida

Considerando apenas medidas projetivas, é conveniente dividir a exposição em duas possíveis situações: estados (i) *sem* e (ii) *com* degenerescência.

(i) Caso não degenerado

Se o resultado do observável $\hat{A}$ no estado $|\psi\rangle$ for um autovalor não degenerado λ_i, teremos imediatamente após a medida o sistema dado por um *novo* vetor de estado $|\psi_i\rangle$, que corresponde à projeção (normalizada) do estado $|\psi\rangle$ no autovetor $|a_i\rangle$ associado ao autovalor medido λ_i.

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 do sistema quântico

- **Representação de Schrödinger:**

Na representação onde $|\psi(t)\rangle$ é o vetor de estado no instant t, a evolução temporal do estado de um sistema quântico fechado é governada pela equação de Schrödinger

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

onde $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\nabla}^2(\cdot) + \hat{V}(\cdot)$ é o operador Hamiltoniano.

Para um sistema isolado e com Hamiltoniano independente do tempo, é possível integrar diretamente a equação do estado inicial $|\psi(t_o)\rangle$, no instante t_o, e obter:

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

Comparando o resultado com a conceito geral de operador, como uma transformação linear de um vetor do espaço, neste caso entre instantes diferentes:

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

temos uma transformação $|\psi(t_o)\rangle \to |\psi(t)\rangle$, através do operador $\hat{U}(t, t_o)$.

Assim, o termo exponencial pode ser entendido como um operador de evolução temporal unitário (i.e., que não modificia a norma do vetor de estado, sempre normalizado):

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

O significado da exponencial do operador Hamiltoniano, como explicado no link ao lado, pode ser obtido através da expansão do operador em uma série de Taylor.

- **Representação de Heisenberg:**

Na representação de Schrödinger, o operador de evolução temporal evolui o vetor de estado do sistema. Uma representação alternativa, igualmente válida, é a representação de Heisenberg, onde os vetores de estados são transformados por operadores que evoluem no tempo. Essas duas representações são 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, portanto, descrever a evolução temporal do sistema em termos do 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:

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

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

A representação de Heisenberg é particularmente útil no contexto de processamento de informação e computação quântica, especialmente quando os operadores são representados por matrizes. A equação de Heisenberg também é útil para introduzir a descrição de sistemas quânticos abertos, onde uma formulação em termos da equação mestra da matriz densidade permite lidar com o fenômeno de decoerência e dissipação.

- **Representação de Interação:**

Há ainda outras forma de representar a dinâmica de um sistema quântico, mesmo para o caso mais simples de sistemas fechados. Pelo menos uma delas vale citar aqui, pois é bastante usada e apresentada em cursos introdutórios: a chamada representação de interação. Em analogia com a discussão anterior, basta dizer que nesta representação, tanto os estados como os operadores podem evoluir no tempo. Esta representação é particularmente útil quando o Hamiltoniano (ou parte dele) tem uma dependência explicita no tempo.