Aula 1

Postulados & Estrutura Matemática da MQ

Fundamentos da Interação da Radiação com a Matéria
SFI5905 / IFSC-USP

25/03/2021

Sérgio R. Muniz

Postulados da Mecânica Quântica

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 dadas pela *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 Heisenberg).

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 $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle\}$ forma uma base de um espaço, $\mathcal{H}$, finito (dimensão-n), e 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.

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

Postulado 2: observáveis físicos

Observáveis são operadores Hermitianos
Quantidades físicas mensuráveis, como energia e momento linear são chamados de observáveis físicos, 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.

Decomposição Espectral

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:

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

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

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

Em um **operador Hermitiano**: $A_{ij} = A_{ji}^{*}, \forall i \neq j$.

Postulado 3: resultados de medidas físicas

Resultados de uma medida
Os possíveis resultados de uma medida de um observável físico são, necessariamente, autovalores do operador correspondente. De acordo com este postulado, esses são os únicos valores possíveis da medida.

Vamos concentrar a atenção no tipo mais comum e conhecido, denominado de **medidas projetivas**, de operadores de projeção.

Medidas projetivas **não** são as únicas formas de medidas na mecânica quântica (nem as mais práticas), mas são as mais simples de entender.

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 $\hat{A}$

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

A probabilidade de obter o resultado λ_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

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

O conjunto $\{|a_m^k\rangle\}$ 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 $\mathcal{M}$.

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

Postulado 5: estado após uma medida

Estado *posterior* em medidas projetivas

(i) Caso não degenerado:

se o resultado for λ_i (não degenerado), tem-se imediatamente após a medida o estado $|\psi_i\rangle$ dado pelo **autovetor correspondente** a 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 de $\hat{A}$, tal que $\hat{A}\,|a_i\rangle = \lambda_i\,|a_i\rangle$.

Supondo que a medida resultou no valor λ_i:

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

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

Equivale a projetar $|\psi\rangle$ nesse autovetor

Postulado 5: estado após uma medida

(ii) **Caso degenerado:**

se o resultado for um autovalor degenerado λ_m do operador $\hat{A}$, o estado $|\psi_m\rangle$ é dado pela projeção no **subespaço** $\mathcal{M}$ **dos autovetores** com λ_m.

Na base do observável $\hat{A}$, onde $\{|a_m^k\rangle\}$ é o subespaço com autovalor λ_m, tal que $\hat{A}\,|a_m^k\rangle = \lambda_m\,|a_m^k\rangle$.

Se a medida for λ_m, 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 $\mathcal{M}$

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

Equivale a projetar $|\psi\rangle$ no subespaço $\mathcal{M}$

Postulado 6: evolução dinâmica do sistema

Schrödinger Picture

A evolução temporal do vetor de estado de um sistema quântico fechado é dada pela equação de Schrödinger.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi_s(t)\right\rangle = \hat{H}\left|\psi_s(t)\right\rangle$$

Para Hamiltoniano independente do tempo, temos:

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

A exponencial define o ***operador unitário de evolução temporal***

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

que evolui o vetor de estado $|\psi(t_o)\rangle \to |\psi(t)\rangle$, tal que:

$$\left|\psi_s(t)\right\rangle = \hat{U}(t,t_o)\left|\psi_s(t_o)\right\rangle .$$

Evolução temporal é no ***vetor de estado***

Postulado 6: evolução dinâmica do sistema

Heisenberg Picture

Nesta representação os vetores de estados são transformados por operadores que evoluem no tempo.

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

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

As duas representações são **completamente equivalentes**: *predições da MQ são dadas por produtos internos, que não são afetadas*

Neste caso, a evolução temporal é dada pela **Equação de Heisenberg**

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

Evolução temporal é no ***operador***

Postulado 6: evolução dinâmica do sistema

Interaction Picture

Representação particularmente útil em problemas onde o Hamiltoniano depende explicitamente do tempo e pode ser dividido em duas partes:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$$

Neste caso, temos

$$|\psi_{_I}(t)\rangle = \exp\Big(i\hat{H}_o(t - t_o)/\hbar\Big)\,|\psi_s(t)\rangle$$

$$\hat{A}_{_I}(t) = \exp\Big(i\hat{H}_o(t - t_o)/\hbar\Big) \cdot \hat{A}_s \cdot \exp\Big(-i\hat{H}_o(t - t_o)/\hbar\Big)$$

Definindo $\hat{H}_{_I} = \exp\Big(i\hat{H}_o(t - t_o)/\hbar\Big) \cdot \hat{H}_1 \cdot \exp\Big(-i\hat{H}_o(t - t_o)/\hbar\Big)$

Temos $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi_{_I}(t)\rangle = \hat{H}_{_I}\,|\psi_{_I}(t)\rangle$ e $\frac{d}{dt}\hat{A}_{_I} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_{_I}, \hat{H}_I] + \frac{\partial \hat{A}_{_I}}{\partial t}$

Evolução temporal tanto do ***vetor de estado*** como do ***operador***

Postulados II: funções de onda

Postulados resumidos II – *versão funções de onda*

1. O *estado do sistema* físico é descrito pela **função de onda** $\psi(\mathbf{r}, t)$ que possui toda a informação do sistema. Essa função deve ser contínua, unívoca (injetora), diferenciável e quadrado-integrável*.
2. Medidas de **observáveis** físicos são representas por *operadores Hermitianos* lineares, construídos a partir dos operadores† de posição e momento linear: $\hat{x} = x \cdot \square$, e $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\square$.
3. Os possíveis *resultados de uma medida* são **autovalores** do operador (observável) correspondente.
4. As **probabilidades** dos resultados são dados pelo *Regra de Born*‡.
5. O **estado pós medida** é uma autofunção do *subespaço dos **autofunções*** correspondente ao resultado (autovalor) medido.
6. A **evolução temporal** do vetor de estado é governada pela equação de Schrödinger.

(*) O espaço de Hilbert é formado pelas funções quadrado-integráveis $L_2(a, b)$.
(†) Observáveis *sem análogo clássico*, como *spin*, são definidos de outra forma.

Existem ainda outras formas de apresentar esses postulados.