F 689 – Mecânica Quântica I

2º Semestre de 2022
26/09/2022
Aula 11

Os postulados da mecânica quântica

Mecânica Clássica

Estados de uma partícula ou de um sistema de partículas:

É BEM DETERMINADO UMA VEZ DADA A POSIÇÃO $\vec{r}$ E O MOMENTO LINEAR $\vec{p}$ NUM DETERMINADO INSTANTE DE TEMPO: $(\vec{r}(t_0), \vec{p}(t_0))$

(FORMALISMO HAMILTONIANO) 6 VARIÁVEIS

Espaço de estados de uma partícula ou de um sistema de partículas:

CONJUNTO TOTAL DOS VALORES POSSÍVEIS DE $(\vec{r}, \vec{p}) \Rightarrow \mathbb{R}^6$

Mecânica Clássica

Quantidades físicas: NO FORMALISMO HAMILTONIANO, QUALQUER QUANTIDADE FÍSICA É UMA FUNÇÃO DE $(\vec{r},\vec{p})$:

$$F(\{\vec{r},\vec{p}\}) = F(\vec{r},\vec{p})$$

EXEMPLOS: (i) $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ (ii) $H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{r})$

Evolução temporal: EQS. DE HAMILTON.

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

ONDE $(q_1, q_2, q_3) = (x, y, z)$

$(p_1, p_2, p_3) = (p_x, p_y, p_z)$

EQUIVALENTEMENTE, PARA O FORMALISMO LAGRANGIANO OU AS PRÓPRIAS LEIS DE NEWTON.

Aula passada

Postulado 1: O estado de um sistema físico num instante t_0 é determinado por um ket do espaço de estados $\mathcal{E}$:

$$|\psi(t_0)\rangle \in \mathcal{E}$$

LINEAR

Postulado 2: Toda quantidade física $\mathcal{A}$ é descrita por um operador A que age em $\mathcal{E}$. A é um observável, ou seja, um operador Hermitiano cujos auto-estados formam uma base de $\mathcal{E}$.

Postulado 3: Os únicos resultados possíveis de serem obtidos em uma medida de $\mathcal{A}$ são os auto-valores do operador A.

a) Os auto-valores são reais, pois A é Hermitiano.
b) Se o espectro é discreto, os resultados possíveis são quantizados.

Mecânica quântica

Postulado 4 (Princípio da decomposição espectral): Se o estado do sistema é $|\psi\rangle$ a probabilidade de se obter um determinado auto-valor de A é:

i) Espectro de A é discreto e não-degenerado:

$$A\,|u_n\rangle = a_n\,|u_n\rangle\,, \quad \langle u_m|u_n\rangle = \delta_{mn}$$

PROBABILIDADE DE SE MEDIR a_n É:

$P(a_n) = |\langle u_n|\psi\rangle|^2$ SUPONDO $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

NOTE QUE, SE EXPANDIRMOS $|\psi\rangle$ NA BASE $\{|u_n\rangle\}$

$|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle$ ONDE $c_n = \langle u_n|\psi\rangle$

$\Rightarrow P(a_n) = |c_n|^2$

SE $\langle\psi|\psi\rangle = 1$: $\sum_n P(a_n) = \sum_n |c_n|^2 = 1$

Mecânica quântica

Postulado 4 (Princípio da decomposição espectral): Se o estado do sistema é $|\psi\rangle$ a probabilidade de se obter um determinado auto-valor de A é:

ii) Espectro de A é discreto e degenerado:

$$A\left|u_n^i\right\rangle = a_n\left|u_n^i\right\rangle,\ (i=1,2,\ldots,g_n)\quad \left\langle u_m^i|u_n^j\right\rangle = \delta_{mn}\delta_{ij}$$

NESSE CASO: $P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2$

NOTEM QUE EU SOMO OS MÓDULOS QUADRADOS.

COMO ANTES: $|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle$ ONDE $c_n^i = \langle u_n^i|\psi\rangle$

$\Rightarrow P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2$

Mecânica quântica

Postulado 4 (Princípio da decomposição espectral): Se o estado do sistema é $|\psi\rangle$ a probabilidade de se obter um determinado auto-valor de A é:

Em termos de projetores: O PROJETOR NO AUTO-SUB-ESPAÇO DE a_n É: $P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i|$

AGORA NOTEM: $\langle P_n \rangle \equiv \langle\psi|P_n|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} \underbrace{\langle\psi|u_n^i\rangle}_{(\langle u_n^i|\psi\rangle)^*}\langle u_n^i|\psi\rangle$

$$= \sum_{i=1}^{g} |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2 = P(a_n)$$

A PROBABILIDADE DE SE MEDIR a_n PODE SER ENCONTRADA ATRAVÉS DO VALOR ESPERADO DO PROJETOR P_n NO ESTADO $|\psi\rangle$.

Mecânica quântica

Postulado 4 (Princípio da decomposição espectral): Se o estado do sistema é $|\psi\rangle$ a probabilidade de se obter um determinado auto-valor de A é:

iii) Espectro de A é contínuo e não-degenerado:

$$A\,|v_\alpha\rangle = \alpha\,|v_\alpha\rangle\,, \quad \langle v_\alpha | v_{\alpha'}\rangle = \delta\,(\alpha - \alpha') \qquad \alpha \in [a,b]$$

COMO O OPERADOR POSIÇÃO X.

NESSE CASO, MEDIDAS DE A SÓ TÊM PROBABILIDADES FINITAS ASSOCIADAS A INTERVALOS DE VALORES.

A PROBABILIDADE DE SE MEDIR A COM VALORES DE α ENTRE α E $\alpha + d\alpha$ É:

$$dP(\alpha) = \underbrace{|\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2}_{\rho(\alpha)}\, d\alpha$$

DEFINE-SE A DENSIDADE DE PROBABILIDADE DE MEDIDA DE A:

$$\rho(\alpha) = \frac{dP(\alpha)}{d\alpha} = |\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2$$

SE $\alpha \in [a_1, a_2] \Rightarrow P(\alpha \in [a_1, a_2]) = \int_{a_1}^{a_2} |\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2\, d\alpha$

EXPANDINDO $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = \int d\alpha \; C(\alpha)\, |v_\alpha\rangle \qquad C_\alpha = \langle v_\alpha|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow dP(\alpha) = |C_\alpha|^2 \, d\alpha$$

FINALMENTE: $P_\alpha = |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha|$

$$\Rightarrow \langle\psi|P_\alpha|\psi\rangle = \langle\psi|v_\alpha\rangle\langle v_\alpha|\psi\rangle$$

$$= |\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2$$

$$\Rightarrow dP(\alpha) = \langle\psi|P_\alpha|\psi\rangle \, d\alpha$$

EXEMPLO: MEDIDA DE X EM 1D

$$X|x\rangle = x|x\rangle$$

$$dP(x) = |\underbrace{\langle x|\psi\rangle}_{\psi(x)}|^2 \, dx = |\psi(x)|^2 \, dx$$

REGRA DE BORN

Mecânica quântica

Postulado 4 (Princípio da decomposição espectral):

Normalização: SE $|\psi\rangle$ NÃO É NORMALIZADO A 1: $\langle\psi|\psi\rangle \neq 1$

$P_T = \sum_n P(a_n)$ E $P(a_n) \rightarrow \dfrac{P(a_n)}{P_T}$

$P_T = \int d\alpha\, P(\alpha)$ E $dP(\alpha) \rightarrow \dfrac{dP(\alpha)}{P_T}$

É MELHOR SEMPRE TRABALHAR COM ESTADOS $|\psi\rangle$ JÁ NORMALIZADOS.

Fase global: SE $|\psi\rangle \longrightarrow e^{i\theta}|\psi\rangle$, AS PROBABILIDADES NÃO MUDAM:

$P(a_n) = \langle\psi|P_n|\psi\rangle \longrightarrow \left(\langle\psi|e^{-i\theta}\right) P_n \left(e^{i\theta}|\psi\rangle\right) = \langle\psi|P_n|\psi\rangle$

O CASO CONTÍNUO É ANÁLOGO.

Exemplo

Base: $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$

Observável: $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 2 & 0 \\ i & 0 & 2 \end{pmatrix}$

Estado:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{2}|2\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle$$

$\langle\psi|\psi\rangle = \left(\frac{1}{2}+\frac{1}{4}+\frac{1}{4}\right) = 1$ ✓

Numa medida de A, que valores podem ser obtidos e com que probabilidade?

DIAGONALIZO A PARA OBTER SEUS AUTO-VALORES E AUTO-VETORES.

$$\begin{vmatrix} 2-\lambda & 0 & -i \\ 0 & 2-\lambda & 0 \\ i & 0 & 2-\lambda \end{vmatrix} = (2-\lambda)^3 - (2-\lambda) = (2-\lambda)(4-4\lambda+\lambda^2-1) = 0$$

⇒ RESOLVENDO:

$\lambda_1 = 1$ $\quad |\lambda_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - i|3\rangle)$

$\lambda_2 = 2$ $\quad |\lambda_2\rangle = |2\rangle$

$\lambda_3 = 3$ $\quad |\lambda_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + i|3\rangle)$

VALORES POSSÍVEIS COMO RESULTADO DE UMA MEDIDA DE A: 1, 2, OU 3. (TODOS NÃO DEGENERADOS)

$$P(\lambda_1) = |\langle \lambda_1 | \psi \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle 1| + i\langle 3|) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle + \frac{1}{2} |2\rangle + \frac{1}{2} |3\rangle \right) \right|^2$$

$$= \left| \frac{1}{2} + \frac{i}{2\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{4} + \frac{1}{8} = \frac{3}{8}$$

$$P(\lambda_2) = |\langle \lambda_2 | \psi \rangle|^2 = \left| \frac{1}{2} \right|^2 = \frac{1}{4}$$

$$P(\lambda_3) = |\langle \lambda_3 | \psi \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle 1| - i\langle 3|) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle + \frac{1}{2} |2\rangle + \frac{1}{2} |3\rangle \right) \right|^2$$

$$= \left| \frac{1}{2} - \frac{i}{2\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{4} + \frac{1}{8} = \frac{3}{8}$$

CHECANDO: $P(\lambda_1) + P(\lambda_2) + P(\lambda_3) = 1$

$$\frac{3}{8} + \frac{1}{4} + \frac{3}{8} = 1 \checkmark$$

Mecânica Quântica

Postulado 5 (Colapso da função de onda): Se o estado do sistema é $|\psi\rangle$ e, na medida de um observável A obtém-se o auto-valor a_n, então, imediatamente após a medida o estado do sistema passa a ser

$$\frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}$$

que é a projeção normalizada no auto-sub-espaço de a_n.

O DENOMINADOR ACIMA GARANTE QUE O ESTADO ESTÁ NORMALIZADO:

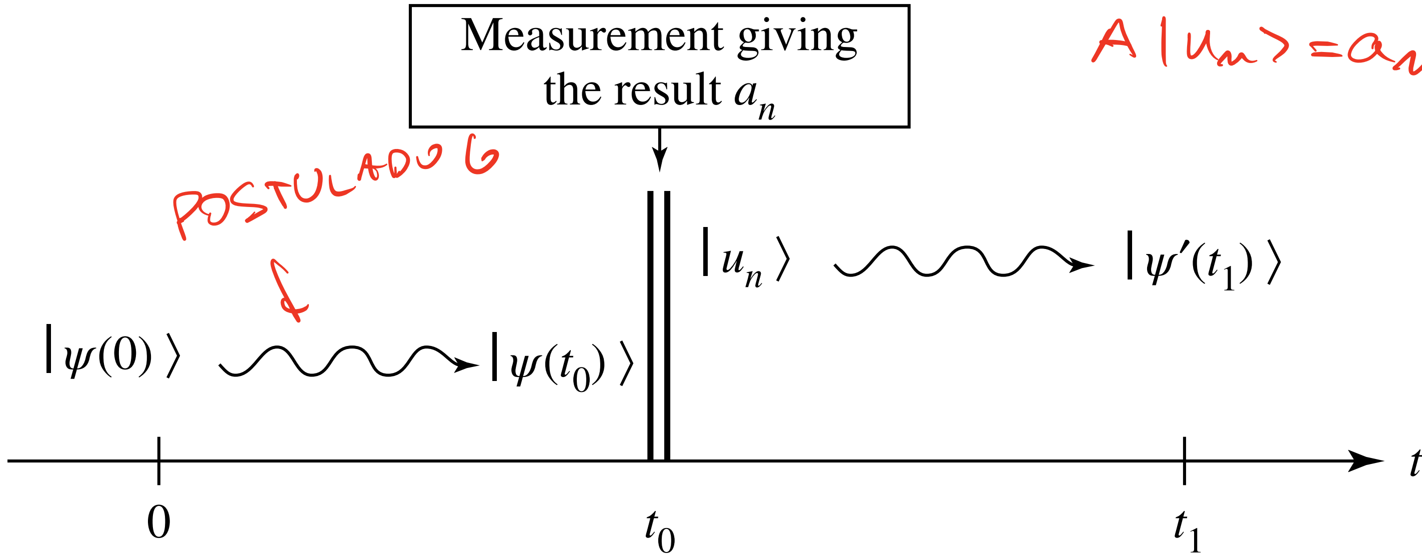
$|\psi'\rangle = P_n|\psi\rangle$ (AINDA NÃO NORMALIZADO)

$$\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|P_n^{+}P_n|\psi\rangle = \langle\psi|P_nP_n|\psi\rangle = \langle\psi|P_n|\psi\rangle$$

$$|\psi''\rangle = \frac{|\psi'\rangle}{\sqrt{\langle\psi'|\psi'\rangle}} = \frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}$$

$A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle$

POSTULADO 6



$$|\psi(t_0^-)\rangle = \sum_n c_n|u_n\rangle \qquad c_n = \langle u_n|\psi\rangle$$

$$P_n|\psi(t_0^-)\rangle = |u_n\rangle\underbrace{\langle u_n|\psi(t_0^-)\rangle}_{c_n} = c_n|u_n\rangle \xrightarrow{\text{NORMALIZO}} |u_n\rangle$$

SE O ESPECTRO FOR DEGENERADO:

$$|\psi(t_0^+)\rangle = \frac{P_n|\psi(t_0^-)\rangle}{\sqrt{\langle\psi(t_0^-)|P_n|\psi(t_0^-)\rangle}} \qquad P_n = \sum_{i=1}^{g_n}|u_n^i\rangle\langle u_n^i|$$

$$P_n|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i|u_n^i\rangle$$

Exemplo

Base: $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$

Observável: $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 2 & 0 \\ i & 0 & 2 \end{pmatrix}$

Estado:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{2}|2\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle$$

Suponha que ao medirmos A, tenhamos obtido o auto-valor $\lambda_1 = 1$. Qual é o estado do sistema logo após a medida?

$$|\psi'\rangle = P_{\lambda_1}|\psi\rangle = |\lambda_1\rangle \underbrace{\langle\lambda_1|\psi\rangle}_{z} = z|\lambda_1\rangle \xrightarrow{\text{NORMALIZAÇÃO}} |\lambda_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - i|3\rangle)$$

Mecânica Quântica

Postulado 6: A evolução temporal do sistema é determinada pela equação de Schrödinger

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

onde $H(t)$ é o Hamiltoniano do sistema (geralmente sua energia total).