CAPÍTULO 3: OS POSTULADOS DA MECÂNICA QUÂNTICA

NA MECÂNICA CLÁSSICA, O ESTADO DE UMA PARTÍCULA É DETERMINADO POR SUA POSIÇÃO E SUA VELOCIDADE:

$$\vec{r} = (x, y, z) \quad \text{E} \quad \vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$$

OU, ALTERNATIVAMENTE, POR SUA POSIÇÃO E SEU MOMENTO LINEAR:

$$\vec{r} = (x, y, z) \quad \text{E} \quad \vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$$

O ESPAÇO DE ESTADOS POSSÍVEIS DA PARTÍCULA É O CHAMADO ESPAÇO DE FASES: DE TODOS OS VALORES POSSÍVEIS DAS 6 VARIÁVEIS: $(x, y, z, p_x, p_y, p_z) \equiv (\vec{r}, \vec{p})$

DADO O ESTADO INICIAL $(\vec{r}_0, \vec{p}_0)$, OS ESTADOS POSTERIORES $(\vec{r}(t), \vec{p}(t))$ SÃO DETERMINISTICAMENTE DADOS PELAS EQUAÇÕES DE HAMILTON:

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{E} \quad \frac{\partial p_i}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (q_1 = x,\ q_2 = y,\ q_3 = z)$$

ONDE $H = H(\vec{q}, \vec{p}, t)$ É O HAMILTONIANO DA PARTÍCULA.

OUTRAS FORMULAÇÕES, COMO AS EQUAÇÕES DE NEWTON, OU A FORMULAÇÃO LAGRANGIANA SÃO EQUIVALENTES:

$$m \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \vec{F}(\vec{r}, \vec{v}, t)$$

ONDE $\vec{F}(\vec{r}, \vec{v}, t)$ É A FORÇA SOBRE A PARTÍCULA, OU:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$$

ONDE $L = L(q_i, \dot{q}_i, t)$ É A LAGRANGIANA DA PARTÍCULA.

VAMOS A SEGUIR DESCREVER CONCEITOS ANÁLOGOS NA MECÂNICA QUÂNTICA, ATRAVÉS DE VÁRIOS POSTULADOS.

POSTULADO 1: O ESTADO DE UM SISTEMA FÍSICO EM UM DADO INSTANTE t_0 É DEFINIDO POR UM KET $|\psi(t_0)\rangle \in \mathcal{E}$.

POSTULADO 2: TODA QUANTIDADE FÍSICA MENSURÁVEL $\underline{A}$ É DESCRITA POR UM OPERADOR, $\underline{A}$, AGINDO EM $\mathcal{E}$. $\underline{A}$ É SEMPRE UM <u>OBSERVÁVEL</u>, OU SEJA, UM OPERADOR HERMITIANO CUJOS AUTO-VETORES FORMAM UMA BASE DE $\mathcal{E}$.

POSTULADO 3: OS ÚNICOS RESULTADOS POSSÍVEIS DE SE OBTER NUMA MEDIDA DE $\underline{A}$ SÃO OS AUTO-VALORES DO OPERADOR $\underline{A}$.

(a) OS AUTO-VALORES SÃO REAIS, POIS $\underline{A}$ É HERMITIANO.

(b) SE O ESPECTRO É DISCRETO, OS RESULTADOS POSSÍVEIS SÃO QUANTIZADOS.

POSTULADO 4: PRINCÍPIO DA DECOMPOSIÇÃO ESPECTRAL

HÁ ALGUNS CASOS A SE CONSIDERAR SEPARADAMENTE. EM TODOS OS CASOS, VAMOS SUPOR ESTADOS NORMALIZADOS: $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.

i) ESPECTRO DISCRETO E NÃO-DEGENERADO

SE A PARTÍCULA ESTÁ NO ESTADO NORMALIZADO $|\psi\rangle$ E MEDE-SE A QUANTIDADE $\underline{A}$, E OS AUTO-VETORES E AUTO-VALORES DE $\underline{A}$ SÃO:

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

ENTÃO, A PROBABILIDADE DE SE MEDIR $\underline{a_n}$ É

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

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

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|u_n\rangle \quad \text{ONDE} \quad c_n = \langle u_n|\psi\rangle$$

LOGO: $P(a_n) = |c_n|^2$

ii) ESPECTRO DISCRETO E DEGENERADO

NESSE CASO,

$$A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle \quad (i=1,2,\dots,g_n)$$

$$\langle u_n^i|u_m^j\rangle = \delta_{m,n}\,\delta_{i,j}$$

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

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

HÁ UMA OUTRA MANEIRA DE ESCREVER ESSAS PROBABILIDADES. O PROJETOR NO AUTO-SUB-ESPAÇO DE $\underline{a_n}$ É:

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

SEGUE QUE: $\langle\psi|P_n|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} \langle\psi|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi\rangle$

$$= \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2$$

ASSIM: $P(a_n) = \langle\psi|P_n|\psi\rangle$.

NOTE QUE ESSA EXPRESSÃO É VÁLIDA TANTO NO CASO DEGENERADO QUANTO NO NÃO.

iii) ESPECTRO CONTÍNUO NÃO DEGENERADO

SE AGORA O ESPECTRO DE $\underline{A}$ FOR CONTÍNUO:

$$A|v_\alpha\rangle = \alpha|v_\alpha\rangle$$

E: $|\psi\rangle = \int d\alpha \; c(\alpha)\,|v_\alpha\rangle$ ONDE $c(\alpha) = \langle v_\alpha|\psi\rangle$

ENTÃO A PROBABILIDADE DE SE MEDIR $\underline{A}$ E OBTER UM RESULTADO ENTRE α E $\alpha + d\alpha$ É:

$$dP(\alpha) = |c(\alpha)|^2 d\alpha = |\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2 d\alpha \equiv \rho(\alpha)\, d\alpha$$

NOTE QUE $|c(\alpha)|^2 = |\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2$ É UMA DENSIDADE DE PROBABILIDADE.

ASSIM COMO ANTES:

$$\rho(\alpha) = \langle\psi|P_\alpha|\psi\rangle$$

ONDE: $P_\alpha = |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha|$.

EM QUALQUER CASO, SE O ESTADO NÃO ESTIVER NORMALIZADO, PODE-SE USAR AS FÓRMULAS SE DIVIDIRMOS PELA PROBABILIDADE TOTAL:

$$P_T = \sum_n P(a_n) \quad \text{OU}$$

$$P_T = \int d\alpha \, P(\alpha)$$

MAS O MELHOR É SEMPRE NORMALIZAR O ESTADO A 1: $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.

ALÉM DISSO, UMA FASE GLOBAL NÃO ALTERA AS PROBABILIDADES. SE:

$$|\psi'\rangle = e^{i\theta}|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \quad P(a_n) = \langle\psi'|P_n|\psi'\rangle = \langle\psi|e^{-i\theta} P_n e^{i\theta}|\psi\rangle = \langle\psi|P_n|\psi\rangle$$

$$\text{e} \quad \rho(\alpha) = \langle\psi'|P_\alpha|\psi'\rangle = \langle\psi|e^{-i\theta} P_\alpha e^{i\theta}|\psi\rangle = \langle\psi|P_\alpha|\psi\rangle$$

EXEMPLO: SEJA, NA BASE $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ O OPERADOR:

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

E QUE O SISTEMA ESTEJA NO ESTADO

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

QUE VALORES PODEM SER OBTIDOS NUMA MEDIDA DE $\underline{A}$ E COM QUE PROBABILIDADES?

DIAGONALIZANDO $\underline{A}$:

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

$$\Rightarrow (2-\lambda)(4-4\lambda+\lambda^2-1) = 0$$

$$\lambda_2 = 2 \quad \text{OU} \quad \lambda^2 - 4\lambda + 3 = 0 \Rightarrow \lambda_1 = 1 \quad \text{OU} \quad \lambda_3 = 3$$

OS POSSÍVEIS RESULTADOS DE MEDIDAS DE $\underline{A}$ SÃO: 1, 2 OU 3.

$\lambda_1 = 1$: $\begin{pmatrix} 1 & 0 & -i \\ 0 & 1 & 0 \\ i & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{matrix} b = 0 \\ c = -ia \end{matrix}$

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

$\lambda_2 = 2$: $\begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow a = 0 \, ; \, c = 0$

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

$\lambda_3 = 3$: $\begin{pmatrix} -1 & 0 & -i \\ 0 & -1 & 0 \\ i & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{matrix} b = 0 \\ c = ia \end{matrix}$

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

VAMOS AGORA CALCULAR AS PROBABILIDADES.

$$P_{\lambda_1} = |\langle \lambda_1 | \psi \rangle|^2$$

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

$$= \frac{1}{2} + \frac{i}{2\sqrt{2}}$$

$$\Rightarrow P_{\lambda_1} = \frac{1}{4} + \frac{1}{8} = \frac{3}{8}$$

$$P_{\lambda_2} = |\langle \lambda_2 | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{4}$$

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

$$= \frac{1}{2} - \frac{i}{2\sqrt{2}}$$

$$\Rightarrow P_{\lambda_3} = |\langle \lambda_3 | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{4} + \frac{1}{8} = \frac{3}{8}$$

RESULTADO DE B	PROBABILIDADE
1	3/8
2	1/4
3	3/8

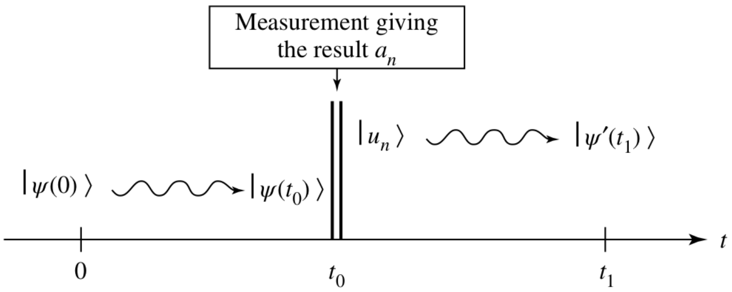
SOMA = 1.

POSTULADO 5: (COLAPSO DA FUNÇÃO DE ONDA)

SE, NA MEDIDA DE UM OBSERVÁVEL $\underline{A}$, 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 DE $|\psi\rangle$ NO AUTO-SUB-ESPAÇO DE a_n, DEVIDAMENTE NORMALIZADA.



NOTE QUE ISSO IMPLICA QUE, SE A MEDIDA NOVAMENTE IMEDIATAMENTE APÓS A PRIMEIRA MEDIDA, O MESMO AUTO-VALOR É OBTIDO NOVAMENTE.

SUPONHA QUE NO EXEMPLO ANTERIOR, A MEDIDA DE $\underline{A}$ TENHA RESULTADO NO AUTOVALOR $\lambda_1 = 1$. LOGO APÓS A MEDIDA, O ESTADO PASSA A SER:

$$|\psi'\rangle = K\,|\lambda_1\rangle\langle\lambda_1|\psi\rangle = \frac{K}{2}\left(1 + \frac{i}{\sqrt{2}}\right)|\lambda_1\rangle$$

ONDE K É UMA CONSTANTE DE NORMALIZAÇÃO. PORÉM, COMO $|\lambda_1\rangle$ JÁ É NORMALIZADO:

$$|\psi'\rangle = |\lambda_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle - i|3\rangle\right)$$

POSTULADO 6: A EVOLUÇÃO TEMPORAL DO SISTEMA É DETERMINADA PELA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER:

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

ONDE $H(t)$ É A HAMILTONIANA DO SISTEMA (GERALMENTE SUA ENERGIA TOTAL)

REGRAS DE QUANTIZAÇÃO

COMO OBTER OS OPERADORES ASSOCIADOS ÀS QUANTIDADES FÍSICAS? SE CONHECEMOS A EXPRESSÃO DO OPERADOR DA MECÂNICA CLÁSSICA EM TERMOS DE $\vec{r}$ e $\vec{p}$, BASTA SUBSTITUIR CADA UM PELO OPERADOR CORRESPONDENTE:

$$\vec{r} \to \vec{R} \qquad \vec{p} \to \vec{P}$$

OU, EM COMPONENTES:

$$x \to X \;,\; y \to Y \;,\; z \to Z$$

$$p_x \to P_x \;,\; p_y \to P_y \;,\; p_z \to P_z$$

SÓ É PRECISO TER CUIDADO COM PRODUTOS DE OPERADORES QUE NÃO COMUTAM.

POR EXEMPLO, SE CLASSICAMENTE TEMOS

$$x p_x \longrightarrow X P_x \text{ OU } P_x X \text{ ?}$$

A REGRA DE QUANTIZAÇÃO NESSE CASO É SIMETRIZAR COMPLETAMENTE A EXPRESSÃO

$$x p_x \longrightarrow \frac{1}{2}(X P_x + P_x X)$$

ANALOGAMENTE:

$$x^2 p_x \longrightarrow \frac{1}{3}(X^2 P_x + X P_x X + P_x X^2)$$

E ASSIM POR DIANTE.

VEREMOS MAIS ADIANTE QUE EXISTEM OBSERVÁVEIS FÍSICOS QUE NÃO TÊM CORRESPONDENTE CLÁSSICO. NESSE CASO, A ATUAÇÃO DO OBSERVÁVEL TEM QUE SER DEFINIDA DIRETAMENTE EM TERMOS DO OPERADOR SOBRE OS KETS. O EXEMPLO MAIS IMPORTANTE É O SPIN.

EXEMPLO: MOMENTO ANGULAR $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

$$L_z = x p_y - y p_x \Rightarrow X P_y - Y P_x$$
$$L_x = y p_z - z p_y \Rightarrow Y P_z - Z P_y$$
$$L_y = z p_x - x p_z \Rightarrow Z P_x - X P_z$$