Física Quântica I / Mecânica Quântica

Descrição dos sistemas físicos em mecânica quântica

Vítor M. Pereira

Departamento de Física | Universidade do Minho

2021/22 — 2º Sem

Lição 7
Postulados da mecânica quântica (cont.)

Aspetos genéricos decorrentes dos postulados

Observáveis compatíveis e incompatíveis

Evolução no tempo de valores esperados (teorema de Ehrenfest)

Quantidades conservadas

Alguns aspetos genéricos decorrentes dos postulados

- O ato de medir uma propriedade física corresponde, em termos da descrição no espaço de estados, a um processo de "filtragem" do vetor de estado. (P6)
- O que significa dizer que *"um sistema foi preparado no estado $|\psi\rangle$"*?
- Como se demonstra/verifica experimentalmente a formulação probabilística? (P4)

$$\mathcal{P}(a_n) = |\langle u_n|\psi\rangle|^2 \qquad \text{ou} \qquad \mathcal{P}(a_n) = \langle\psi|\hat{\mathrm{P}}_n|\psi\rangle$$

- A mecânica quântica é determinística?
- O que acontece à normalização do vetor de estado com o tempo? É preservada?

$$\frac{d}{dt}\Big[\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle\Big] \stackrel{?}{=} 0$$

- Medição de observáveis distintas — uma diferença importante:
  - $\mathcal{B}$ é medida imediatamente após $\mathcal{A}$? (sem evolução temporal entre as duas medidas):

$$|\psi(t_0^-)\rangle \quad \xrightarrow[t=t_0]{\mathcal{A}\to a_n} \quad |\psi(t_0^+)\rangle = |a_n\rangle \quad \xrightarrow[t=t_0^+]{\mathcal{B}\to b_n} \quad |\psi(t_0^{++})\rangle = |b_n\rangle$$

  - $\mathcal{B}$ é medida após um intervalo finito T da $\mathcal{A}$? (ψ evolui no intervalo T segundo a eq. Schrödinger):

$$|\psi(t_0^-)\rangle \xrightarrow[t=t_0]{\mathcal{A}\to a_n} |a_n\rangle = |\psi(t_0^+)\rangle \rightsquigarrow \overset{\text{Eq. Schr.}}{\cdots\cdots\cdots} \rightsquigarrow |\psi(t_0+T^-)\rangle \xrightarrow[t=t_0+T]{\mathcal{B}\to b_n} |b_n\rangle$$

Observáveis compatíveis e incompatíveis

Da medição de qualquer observável $\hat{A}$ resultam duas coisas (P2, P3, P6):

- um valor bem definido a_n, que é um de entre os seus valores próprios $\{a_1, a_2, \dots\}$ (P3);
- a projeção/redução de $|\psi\rangle$ ao subespaço de vetores próprios associados ao resultado a_n (P6):

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\mathcal{A}\to a_n} |\psi'\rangle = |a_n\rangle.$$

Como a medida em simultâneo de outra observável $\hat{B}$ terá um resultado (b_k) que apenas se pode quantificar em termos probabilísticos,

$$\mathcal{P}(\mathcal{B} \to b_k) = |\langle b_k|\psi'\rangle|^2 = |\langle b_k|a_n\rangle|^2 \neq 1,$$

é então incontornável o seguinte facto:

Incerteza na determinação simultânea de diferentes grandezas físicas

Regra geral, não é possível determinar o valor de 2 (ou mais) grandezas físicas $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ simulaneamente com total precisão; ou seja com probabilidade conjunta $\mathcal{P}(\mathcal{A} \to a_n, \mathcal{B} \to b_k) = 1$. A medição de uma indefine a outra.

Mas há uma exceção muito importante: se $|a_n\rangle$ for também um autoestado de $\hat{B}$ com autovalor b_k,

$$\hat{B}\,|a_n\rangle = b_k\,|a_n\rangle, \quad \text{logo} \quad |a_n\rangle = |b_k\rangle, \quad \text{e assim} \quad \mathcal{P}(\mathcal{B} \to b_k) = |\langle b_k|a_n\rangle|^2 = |\langle a_n|a_n\rangle|^2 = 1$$

Observáveis compatíveis

A condição necessária e suficiente é que $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Nesse caso, as duas observáveis dizem-se compatíveis: podem ser medidas simultâneamente com precisão absoluta.

Uma vez que o vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ varia no tempo de acordo com a eq. Schrödinger (ES):

$$\langle \hat{\mathrm{A}} \rangle_\psi \stackrel{\text{def}}{=} \langle \psi(t) | \, \hat{\mathrm{A}}(t) \, | \psi(t) \rangle$$

(é uma quantidade que varia no tempo, em geral)

Fazendo a derivada temporal e usando a ES obtemos:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathrm{A}} \rangle_\psi &= \frac{d}{dt} \Big[\langle \psi(t) | \hat{\mathrm{A}}(t) | \psi(t) \rangle \Big] \\
&= \left[\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right] \hat{\mathrm{A}}(t) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \left[\frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathrm{A}}(t) \right] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{\mathrm{A}}(t) \left[\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right] \\
&= \left[\frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \hat{\mathrm{H}}(t) \right] \hat{\mathrm{A}}(t) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \left[\frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathrm{A}}(t) \right] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{\mathrm{A}}(t) \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathrm{H}}(t) | \psi(t) \rangle \right] \\
&= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \hat{\mathrm{H}}(t) \hat{\mathrm{A}}(t) | \psi(t) \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \hat{\mathrm{A}}(t) \hat{\mathrm{H}}(t) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \left[\frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathrm{A}}(t) \right] | \psi(t) \rangle \\
&= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \big[\hat{\mathrm{H}}(t), \hat{\mathrm{A}}(t) \big] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \left[\frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathrm{A}}(t) \right] | \psi(t) \rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar} \Big\langle \big[\hat{\mathrm{A}}(t), \hat{\mathrm{H}}(t) \big] \Big\rangle_\psi + \Big\langle \frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathrm{A}}(t) \Big\rangle_\psi
\end{aligned}$$

Teorema de Ehrenfest (dependência temporal dos valores esperados)

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathrm{A}} \rangle_\psi = \frac{1}{i\hbar} \Big\langle \big[\hat{\mathrm{A}}(t), \hat{\mathrm{H}}(t) \big] \Big\rangle_\psi + \Big\langle \frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathrm{A}}(t) \Big\rangle_\psi$$

Determinadas observáveis são especiais:

- Se $\hat{\mathrm{A}}$ não varia *explicitamente* com o tempo, ou seja $\frac{\partial \hat{\mathrm{A}}}{\partial t} = 0$,
- e se $\hat{\mathrm{A}}$ comuta com o Hamiltoniano, $[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{H}}] = 0$,

então a formulação geral do teorema de Ehrenfest reduz-se a

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{\mathrm{A}} \rangle_\psi = \frac{1}{i\hbar}\Big\langle [\hat{\mathrm{A}}(t), \hat{\mathrm{H}}(t)] \Big\rangle_\psi + \Big\langle \frac{\partial}{\partial t}\hat{\mathrm{A}}(t) \Big\rangle_\psi \qquad \longrightarrow \qquad \frac{d}{dt}\langle \hat{\mathrm{A}} \rangle_\psi = 0, \quad \forall\, |\psi\rangle$$

Quantidades conservadas

Sempre que uma grandeza física for descrita por uma observável constante no tempo e que comuta com $\hat{\mathrm{H}}$, ela é designada por constante de movimento e é uma quantidade conservada.

Um caso particular (e importante) é o do próprio Hamiltoniano do sistema:

Em qualquer sistema cujo Hamiltoniano $\hat{\mathrm{H}}$ não tem dependência explícita no tempo, temos

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{\mathrm{H}} \rangle_\psi = 0, \quad \text{qualquer que seja o estado } |\psi(t)\rangle.$$

Consequentemente, o valor esperado da energia desse sistema é constante no tempo.

(tal como em física clássica, tais sistemas designam-se conservativos)

Resumo – Os postulados da mecânica quântica

O vetor de estado Todo o sistema físico é caraterizado por um vetor de estado ou por uma função de onda:

$$|\psi(t)\rangle \qquad \text{ou} \qquad \psi(x,t).$$

Observáveis Todas as quantidades físicas $\mathcal{A}$ são descritas por um operador Hermítico $\hat{\mathrm{A}}$ que atua no espaço de estados do sistema em questão.

Evolução de $|\psi(t)\rangle$ Governada pela equação de Schrödinger, cuja forma geral e independente de qualquer base é

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{\mathrm{H}}(t)\,|\psi(t)\rangle.$$

($\hat{\mathrm{H}}$ é o Hamiltoniano, operador para a energia total)

Medições Uma medida de $\mathcal{A}$ pode apenas devolver um dos autovalores $\{a_1,\ a_2,\ \ldots\}$ da observável $\hat{\mathrm{A}}$ correspondente.

Probabilidades Na medição de $\mathcal{A}$, a probabilidade de registar um dos possíveis autovalores a_n é

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_{\alpha=1}^{g_n}\left|\langle a_n^{(\alpha)}|\psi\rangle\right|^2 = \langle\psi|\hat{\mathrm{P}}_{\{a_n\}}|\psi\rangle, \qquad \text{onde} \qquad \hat{\mathrm{P}}_{\{a_n\}} \equiv \sum_{\alpha=1}^{g_n}|a_n^{(\alpha)}\rangle\langle a_n^{(\alpha)}|,$$

g_n é a degenerescência de a_n, e $\{|u_n^\alpha\rangle\}$ são os g_n autovetores do operador $\hat{\mathrm{A}}$ associados ao autovalor a_n. Se a_n for não-degenerado, então $g_n = 1$ (e desaparecem os índices α).

Redução do estado No ato de medirmos $\mathcal{A}$ no instante $t = t_0$ num sistema no estado $|\psi(t_0^-)\rangle$ e de obtermos o valor a_n, o vetor de estado é imediatamente a reduzido para

$$|\psi(t_0^-)\rangle \xrightarrow[t=t_0]{\mathcal{A}\to a_n} |\psi(t_0^+)\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi|\hat{\mathrm{P}}_{\{a_n\}}|\psi\rangle}}\hat{\mathrm{P}}_{\{a_n\}}|\psi\rangle.$$