

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 6

Postulados da mecânica quântica

Recapitulação da descrição em Física Clássica

Discussão dos postulados da MQ

- Postulado 1 – vetor de estado / função de onda
- Postulado 2 – grandezas físicas
- Postulado 3 – resultados de uma medida
 - Representação adaptada a diferentes observáveis
 - Valores próprios degenerados
 - Notação consistente dos auto-estados
- Postulado 4 – interpretação probabilística
- Postulado 5 – evolução no tempo
- Postulado 6 – medição e redução do vetor de estado

Postulados

São as “regras” que ligam a descrição matemática com o mundo físico e o permitem quantificar.

Postulados da descrição quântica dos sistemas físicos:

- 1 O vetor de estado / função de onda
- 2 Observáveis e a descrição das quantidades físicas
- 3 Resultados mensuráveis
- 4 Interpretação probabilística
- 5 Evolução no tempo
- 6 O ato de medir e a redução do vetor de estado

Recordemos como se faz Física Clássica:

- Posições e momentos ($\mathbf{p} = m\mathbf{v}$) são as variáveis dinâmicas fundamentais: $\{x_i, p_i\}$.
- Sabendo-as num dado instante $t = t_0$ determina completamente a evolução futura do sistema.
- Qualquer outra quantidade física é expressa em termos de $\{x_i, p_i\}$. Por exemplo:
 - Energia de uma ou de um sistema de N partículas:

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t), \quad E = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t),$$

- Momento angular:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

... são funções, $\mathcal{F}(x_i, p_i)$, das variáveis dinâmicas fundamentais $\{x_i, p_i\}$.

- A evolução temporal é determinada por uma função em particular, o **Hamiltoniano**: $\mathcal{H}(x_i, p_i)$:
 - Equações de Hamilton \Leftrightarrow equações de Newton;
 - A evolução temporal decorre deterministicamente dadas as condições iniciais;
 - Sabendo $\{x_i(t), p_i(t)\}$, sabemos qualquer outra propriedade física $\mathcal{F}(x_i, p_i)$ a qualquer instante.
- Como em física clássica se presume ser possível determinar x_i e p_i com total precisão, qualquer outra quantidade é igualmente especificável com precisão arbitrariamente elevada.

Postulado 1 – vetor de estado / função de onda

[P1] Vetor de estado

Em qualquer instante t , o estado de um sistema é definido pela especificação de um vetor no **espaço de estados** (espaço de Hilbert) desse sistema.

$$|\psi(t)\rangle \quad (\text{vetor de estado})$$

O estado do sistema será representado por uma **função de onda**

$$\psi(\mathbf{r}, t) \quad (\text{função de onda})$$

quando se optar por uma representação contínua (ex: base de posição).

Princípio de sobreposição linear

Qualquer combinação linear de vetores de estado é um vetor de estado:

$$\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle, \quad (\alpha, \beta \in \mathbb{C}).$$

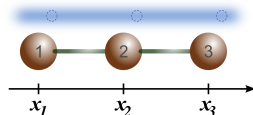
Escolha da base/representação

O vetor de estado é especificado em termos de componentes numa base **completa e ortonormal**:

$$(\text{discreta}) \quad |\psi\rangle = \sum_i \psi_i |u_i\rangle, \quad \langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}$$

$$(\text{contínua}) \quad |\psi\rangle = \int d\mathbf{r} \, \psi(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle, \quad \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

O nosso exemplo



Qualquer um dos kets de base

$$|x_1\rangle, \quad |x_2\rangle, \quad |x_3\rangle$$

é **em si mesmo** um possível estado do sistema.

Por exemplo

$$|\psi\rangle = |x_2\rangle$$

representa um estado em que a posição é absolutamente definida.

Mas **o estado mais geral possível** é

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_i \psi_i |x_i\rangle \\ &= \psi_1 |x_1\rangle + \psi_2 |x_2\rangle + \psi_3 |x_3\rangle \end{aligned}$$

Postulado 2 – grandezas físicas

[P2] Observáveis

Qualquer propriedade **mensurável fisicamente**, \hat{A} , é descrita por um operador linear e **Hermítico**, \hat{A} , definido no espaço de estados do sistema. Tais operadores designam-se **observáveis**.

Implicações de serem operadores Hermíticos

- Possuem um conjunto completo de autovetores:

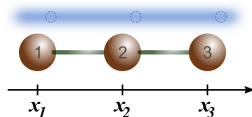
$$\hat{A}|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle.$$

- Autovalores **sempre** reais: $a_n \in \mathbb{R}$.
- Se $a_n \neq a_m \rightarrow \langle u_m|u_n\rangle = 0$.
- O conj. dos seus autovetores $\{|u_n\rangle\}$ constitui uma base para o espaço de estados.

Bases naturais para o espaço de estados

Os autovetores do operador \hat{A} definem uma base para o espaço de estados **especialmente adequada** para descrever a propriedade física que o operador reflete.

O nosso exemplo



A posição \mathcal{X} é descrita por um operador \hat{X} tal que:

$$\hat{X}|x_1\rangle = x_1|x_1\rangle, \quad \hat{X}|x_2\rangle = x_2|x_2\rangle, \quad \hat{X}|x_3\rangle = x_3|x_3\rangle$$

Os $\{|x_1\rangle, |x_2\rangle, |x_3\rangle\}$ são autovetores de \hat{X} .

Como

$$x_1 \neq x_2 \neq x_3,$$

os autovetores correspondentes são ortogonais e definem a base do espaço de estados neste modelo simplificado. Nesta base \hat{X} é **diagonal**:

$$\hat{X} \mapsto X = \begin{pmatrix} x_1 & 0 & 0 \\ 0 & x_2 & 0 \\ 0 & 0 & x_3 \end{pmatrix}$$

e, em geral, o estado do eletrão poderá ser

$$|\psi\rangle = \psi_1|x_1\rangle + \psi_2|x_2\rangle + \psi_3|x_3\rangle.$$

Postulado 3 – resultados de uma medida

[P3] Resultados de uma medida

Num ato **único** de medição da quantidade \mathcal{A} , obter-se-á **um de entre os autovalores** da observável correspondente, \hat{A} , e **nunca** qualquer outro valor.

Porque é que as observáveis são operadores Hermíticos?

Medições naturalmente resultam em números reais.

Origem da quantização dos valores de quantidades físicas

Se o espectro (ou uma porção) de \hat{A} for discreto,

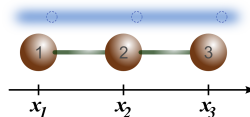
$$a_1, a_2, a_3, \dots$$

os valores possíveis de \mathcal{A} serão **quantizados**.

Porém, **em geral**, o espectro de \hat{A} pode ser:

- totalmente discreto (o nosso exemplo);
- totalmente contínuo (partícula livre);
- parcialm. discreto, parcialm. contínuo (átomo H).

O nosso exemplo



Operador para a **posição** do eletrão:

$$\mathcal{X} \rightarrow \hat{X}.$$

Operador \hat{X} na sua base própria:

$$X = \begin{pmatrix} x_1 & 0 & 0 \\ 0 & x_2 & 0 \\ 0 & 0 & x_3 \end{pmatrix}$$

Apesar de o estado do eletrão ser, em geral,

$$|\psi\rangle = \psi_1|x_1\rangle + \psi_2|x_2\rangle + \psi_3|x_3\rangle,$$

qualquer ato de medição resultará em **apenas um** de entre os 3 possíveis resultados

$$x_1, \quad x_2, \quad x_3,$$

que constituem o espectro do operador \hat{X} .

A energia do elétron no nosso exemplo

Operador Hamiltoniano (energia): \hat{H}

Suponhamos que sabemos que \hat{H} é dado por

$$\hat{H}|x_1\rangle = t|x_2\rangle, \quad \hat{H}|x_2\rangle = t|x_1\rangle + t|x_3\rangle, \quad \hat{H}|x_3\rangle = t|x_2\rangle$$

Nesta que é a **base de autoestados de \hat{X}** , a sua matriz é

$$\hat{H} \mapsto H = \begin{bmatrix} 0 & t & 0 \\ t & 0 & t \\ 0 & t & 0 \end{bmatrix} \quad (t \text{ constante} \in \mathbb{R})$$

Que energias pode ter o elétron?

Uma medição da energia resultará num dos autovalores de \hat{H} .

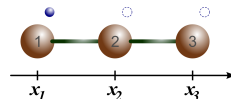
Os autovalores de \hat{H} são (**espectro de energia**)

$$E_1 = -\sqrt{2}t, \quad E_2 = 0, \quad E_3 = \sqrt{2}t$$

...com os autovetores correspondentes:

$$|E_1\rangle \mapsto \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |E_2\rangle \mapsto \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \\ -\sqrt{2} \end{bmatrix}, \quad |E_3\rangle \mapsto \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{bmatrix}.$$

O nosso exemplo



Estados que definem a base de posição

$|x_n\rangle$ representa o e^- no átomo n

- são auto-estados/vetores do operador posição, \hat{X} ;
- estados de **posição absolutamente definida**.

Estados que definem a base de energia

$|E_n\rangle$ representa o e^- com $E = E_n$

- são auto-estados/vetores do operador Hamiltoniano, \hat{H} ;
- estados de **energia absolutamente definida**.

Mudança de representação/base

Uma vez que neste exemplo:

- Os autoestados do operador de **posição** \hat{X} são ortogonais entre si:

$$|x_1\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |x_2\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |x_3\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \langle x_i | x_j \rangle = \delta_{ij}$$

- Mas os autoestados do operador **Hamiltoniano** \hat{H} são também ortogonais entre si:

$$|E_1\rangle \rightarrow \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |E_2\rangle \rightarrow \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \\ -\sqrt{2} \end{bmatrix}, \quad |E_3\rangle \rightarrow \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \langle E_i | E_j \rangle = \delta_{ij}$$

... então, o vetor de estado tanto pode ser expresso segundo

$$|\psi\rangle = \psi_1 |x_1\rangle + \psi_2 |x_2\rangle + \psi_3 |x_3\rangle, \quad \text{na base/representação de } \text{posição},$$

como pode ser, alternativamente, expresso segundo

$$|\psi\rangle = \psi'_1 |E_1\rangle + \psi'_2 |E_2\rangle + \psi'_3 |E_3\rangle, \quad \text{na base/representação de } \text{energia}.$$

A relação entre as **componentes** de cada representação é (mudança de base):

$$\psi'_\alpha = \sum_i \langle E_\alpha | x_i \rangle \psi_i \quad \text{ou} \quad \psi_i = \sum_\beta \langle x_i | E_\beta \rangle \psi'_\beta.$$

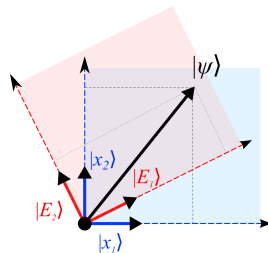
Passando de uma a outra representação/base

Num dado momento, o vetor de estado do sistema tanto pode ser escrito como

$$|\psi\rangle = \psi_1|x_1\rangle + \psi_2|x_2\rangle + \psi_3|x_3\rangle \quad (\text{representação/base de posição})$$

ou como

$$|\psi\rangle = \psi'_1|E_1\rangle + \psi'_2|E_2\rangle + \psi'_3|E_3\rangle \quad (\text{representação/base de energia})$$



Em termos da representação matricial de $|\psi\rangle$, isto significa:

$$|\psi\rangle \mapsto \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{bmatrix} \quad (\text{base de posição}) \quad \text{ou} \quad |\psi\rangle \mapsto \begin{bmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \\ \psi'_3 \end{bmatrix} \quad (\text{base de energia})$$

... onde as componentes se relacionam através de:

$$\psi'_\alpha = \sum_i \langle E_\alpha | x_i \rangle \psi_i \quad \text{ou} \quad \psi_i = \sum_\beta \langle x_i | E_\beta \rangle \psi'_\beta.$$

Mais explicitamente,

$$\begin{bmatrix} \psi'_1 \\ \vdots \\ \psi'_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle E_1 | x_1 \rangle & \langle E_1 | x_2 \rangle & \cdots & \langle E_1 | x_n \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle E_n | x_1 \rangle & \langle E_n | x_2 \rangle & \cdots & \langle E_n | x_n \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{bmatrix} = U \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{bmatrix}$$

Repare-se que a linha “ k ” de U corresponde ao bra $\langle E_k |$ na base original.

Degenerescências no espectro de uma observável:

- É frequente uma observável \hat{A} ter autovalores **repetidos**. Ex: $\{-1, 1, 1, 1, 2, 5\}$.
- Sempre que um autovalor a_n se repete g_n vezes, diz-se que a_n é **g_n -degenerado**:

soluções da eq. característica: $a_1, a_2, \dots, \underbrace{a_3, a_3, \dots, a_3}_{\text{repetido } g_3 \text{ vezes}}, a_4, a_5, \dots, \underbrace{a_k, a_k, \dots, a_k}_{\text{repetido } g_k \text{ vezes}}, \dots$

- Em caso de degenerescência, os g_n autovetores $\{|u_n^{(1)}\rangle, \dots, |u_n^{(g_n)}\rangle\}$ associados ao autovalor a_n cobrem um **subespaço** de dimensão g_n .
- Na prática, é **crucial** saber se um dado autovalor é degenerado ou não. (afeta probabilidades)

Um exemplo

Revisitar a solução do Problema 1 da Folha de Problemas 1.

Um outro exemplo

Consideremos uma observável \hat{A} cuja matriz na base $\{|x_1\rangle, |x_2\rangle, |x_3\rangle\}$ é

$$A = \begin{bmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 4 & -1 \\ 1 & -1 & 4 \end{bmatrix} \xrightarrow{(\lambda-6)(\lambda-3)^2=0} \lambda = \{3, 3, 6\} \xrightarrow{\text{autovalores}} \begin{cases} a_1 = 6 & (g_1 = 1) \\ a_2 = 3 & (g_2 = 2) \end{cases}$$

O autovalor 3 é **duplamente degenerado**. Os autovetores associados a este autovalor são:

$$|a_2\rangle: \begin{bmatrix} 4-a_2 & -1 & 1 \\ -1 & 4-a_2 & -1 \\ 1 & -1 & 4-a_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = 0 \Leftrightarrow w = v - u \Rightarrow \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} \propto \begin{bmatrix} 1 \\ \zeta \\ \zeta - 1 \end{bmatrix}.$$

Escolhendo, por exemplo, $\zeta = 0$, $\zeta = 2$ e normalizando obtemos os dois autovetores ortogonais:

$$|a_2^{(1)}\rangle \mapsto \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad |a_2^{(2)}\rangle \mapsto \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \langle a_2^{(1)} | a_2^{(2)} \rangle = 0.$$

Estes dois autovetores definem uma base para o subespaço de dimensão 2 associado ao autovalor $a_2 = 3$ do operador \hat{A} .

Observáveis

- Maiúscula com **circunflexo**: representa um operador quântico

ex: \hat{A} , \hat{H} , \hat{X} , etc.

- Maiúscula **simples**: representa a matriz associada ao respetivo operador

ex: A , H , X , etc.

- Maiúscula **caligráfica**: representa uma propriedade/grandeza física

ex: \mathcal{A} , \mathcal{H} , \mathcal{X} , etc.

Por exemplo, podemos encontrar a frase: “a cada quantidade física \mathcal{A} está associado um operador \hat{A} que é representado pela matriz A na base ...”

Expansão do vetor de estado explicitando a existência de degenerescências

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^n \psi_k |u_k\rangle \xrightarrow{\text{havendo degenerescências}} |\psi\rangle = \sum_{k=1}^n \sum_{\alpha=1}^{g_k} \psi_k^{(\alpha)} |u_k^{(\alpha)}\rangle$$

\nwarrow índice de degenerescência
 \downarrow índice k identifica o k -ésimo autovalor distinto

Por exemplo, se usássemos os autoestados do operador \hat{A} no exemplo da pág. anterior como base,

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^2 \sum_{\alpha=1}^{g_k} \psi_k^{(\alpha)} |a_k^{(\alpha)}\rangle = \psi_1 |a_1\rangle + \psi_2^{(1)} |a_2^{(1)}\rangle + \psi_2^{(2)} |a_2^{(2)}\rangle.$$

Postulado 4 – interpretação probabilística

[P4] Interpretação probabilística (Max Born)

Ao medirmos a quantidade \mathcal{A} num sistema que se encontra no estado **normalizado** $|\psi\rangle$, a **probabilidade** de obtermos o autovalor **não degenerado** a_n do operador correspondente é dada por

$$\mathcal{P}(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2,$$

onde $|u_n\rangle$ é o autovetor **normalizado** associado a a_n .

Normalizar ou não normalizar o vetor de estado $|\psi\rangle$

$$1 = \sum_n \mathcal{P}(a_n) = \sum_n |\langle u_n | \psi \rangle|^2 = \langle \psi | \psi \rangle$$

Caso $\langle \psi | \psi \rangle \neq 1$, a probabilidade calcula-se através de

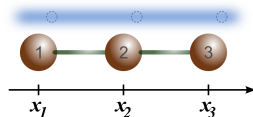
$$\mathcal{P}(a_n) = \frac{|\langle u_n | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

Probabilidades são valores esperados de **projetores**

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

onde $\hat{P}_n \equiv |u_n\rangle\langle u_n|$ é o projetor no subespaço associado ao autovalor a_n .

O nosso exemplo



$$|\psi\rangle = \psi_1 |x_1\rangle + \psi_2 |x_2\rangle + \psi_3 |x_3\rangle$$

Prob. de encontrar o eletrão na posição $\mathcal{X} = x_2$:

$$\mathcal{P}(x_2) = |\langle x_2 | \psi \rangle|^2 = |\psi_2|^2$$

Prob. de obter $\mathcal{E} = E_2 = 0$ numa medida da sua energia:

$$\mathcal{P}(E_2) = |\langle E_2 | \psi \rangle|^2.$$

Relembrando que na pág. 7 atrás determinamos que

$$|E_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |x_1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |x_3\rangle,$$

essa probabilidade é

$$\mathcal{P}(E_2) = \frac{|\psi_1 - \psi_3|^2}{2}.$$

Postulado 4 – interpretação probabilística

O caso de uma base contínua

O exemplo mais comum é o da base de posição. A probabilidade de obtermos $\mathcal{X} \rightarrow [x, x + dx]$ é dada por

$$\mathcal{P}(x) dx = |\langle x|\psi\rangle|^2 dx = |\psi(x)|^2 dx$$

Portanto, $|\psi(x)|^2$ é uma densidade de probabilidade.

Autovalores degenerados

Se o autovalor a_n de \hat{A} tiver degenerescência g_n :

- Existem g_n autoestados linearmente independentes

$$|a_n^{(1)}\rangle, |a_n^{(2)}\rangle, \dots, |a_n^{(g_n)}\rangle$$

associados ao mesmo resultado a_n .

- Nestes casos, a probabilidade $\mathcal{P}(a_n)$ é dada por

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_{\alpha=1}^{g_n} \left| \langle a_n^{(\alpha)} | \psi \rangle \right|^2 = \langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle$$

onde o projetor em questão é agora

$$\hat{P}_n = \sum_{\alpha=1}^{g_n} |a_n^{(\alpha)}\rangle \langle a_n^{(\alpha)}|$$

Independência da base

O valor $\mathcal{P}(a_n) = \langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle$ é **independente** da base onde $|\psi\rangle$ é expresso.

Valores esperados representam “médias de ensemble”

Escrevendo $|\psi\rangle$ na base própria de \hat{A} :

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi_n |u_n\rangle, \quad [\text{onde } \hat{A}|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle]$$

vemos imediatamente que

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_n a_n |\psi_n|^2 = \sum_n \mathcal{P}(a_n) a_n.$$

A fase global do vetor de estado é irrelevante

Se o vetor de estado for $|\psi\rangle$ e introduzirmos

$$|\psi'\rangle = e^{i\theta} |\psi\rangle, \quad (\theta \in \mathbb{R})$$

nenhum resultado se altera:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}'(a_n) &= |\langle u_n | \psi' \rangle|^2 = |\langle u_n | \psi \rangle e^{i\theta}|^2 \\ &= |\langle u_n | \psi \rangle|^2 = \mathcal{P}(a_n), \quad \checkmark \end{aligned}$$

$$\langle \psi' | \hat{A} | \psi' \rangle = e^{-i\theta} e^{i\theta} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad \checkmark$$

Uma implicação importantíssima

O vetor de estado / função de onda ψ codifica **toda** a informação **probabilística** acerca dos possíveis resultados de qualquer medição relativa às observáveis relevantes de um sistema.

- Genericamente, em MQ não podemos perguntar, por exemplo:

“onde está a partícula neste momento?”

ou

“o que faz o sistema neste instante?”

- A teoria quântica apenas fornece resposta a questões de natureza estatística:

“se procurar a partícula numa dada região do espaço, qual é a probabilidade de a encontrar lá?”

ou

“num gás de átomos radioativos, que fração dos átomos espero que decaiam num segundo?”

*A teoria quântica descreve o resultado de **medidas de ensemble**, onde uma “medida de ensemble” consiste em realizar exatamente a mesma experiência/medida sobre um grande número ($N \rightarrow \infty$) de réplicas do sistema de interesse, sendo cada uma dessas réplicas preparada exatamente no mesmo estado.*

Postulado 5 – evolução no tempo

[P5] Evolução do vetor de estado (E. Schrödinger)

A evolução no tempo do vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ é determinada pela **equação de Schrödinger**:

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

Na base de posição esta equação adquire a forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{r}) = \mathcal{H}(\mathbf{r}) \psi(t, \mathbf{r})$$

Operador Hamiltoniano quando existe análogo clássico

- Hamiltoniano clássico é o ponto de partida:

$$\mathcal{H}(x_i, p_i) = \mathcal{T}(x_i, p_i) + \mathcal{V}(x_i, p_i) \quad (\text{energia total})$$

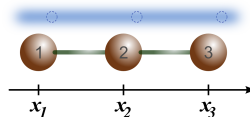
- As variáveis clássicas são promovidas a operadores

$$x_i \rightarrow \hat{X}_i, \quad p_i \rightarrow \hat{P}_i$$

- \hat{H} é portanto a **função** correspondente desses operadores:

$$\hat{H} = \hat{H}(\hat{X}_i, \hat{P}_i)$$

O nosso exemplo



$$|\psi(t_0)\rangle = \psi_1 |x_1\rangle + \psi_2 |x_2\rangle + \psi_3 |x_3\rangle$$



num instante subsequente $t > t_0$



$$|\psi(t)\rangle = \psi_1(t) |x_1\rangle + \psi_2(t) |x_2\rangle + \psi_3(t) |x_3\rangle$$

Nota

Apenas as **componentes** $\psi_i(t)$ variam no tempo. A base é estática.

Estudaremos em detalhe a Eq. Schrödinger e a evolução temporal dentro de poucas aulas.

Postulado 6 – medição e redução do vetor de estado

[P6] Medição e redução do vetor de estado

Se for feita uma medição de \mathcal{A} em $t = t_0$ com o resultado a_n , **imediatamente a seguir** a essa medição o vetor de estado do sistema é **reduzido** para

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\mathcal{A} \rightarrow a_n} \frac{1}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle}} \hat{P}_n |\psi\rangle$$

O caso mais simples ocorre se a_n for não degenerado

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\mathcal{A} \rightarrow a_n} |\psi(t_0^+)\rangle = |u_n\rangle$$

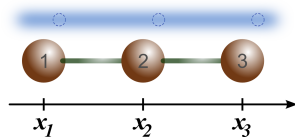
O vetor de estado fica **reduzido ao autoestado** $|u_n\rangle$ de \hat{A} associado ao valor a_n obtido na medição.

Repetição **instantânea** da **mesma** medição de \mathcal{A}

Obteremos o **mesmo** resultado em $t = t_0^+$, porque

$$\mathcal{P}(a_k, t_0^+) = |\langle u_k | \psi(t_0^+) \rangle|^2 = |\langle u_k | u_n \rangle|^2 = \begin{cases} 1, & (k = n) \\ 0, & (k \neq n) \end{cases}$$

O nosso exemplo



$$|\psi(t_0^-)\rangle = \psi_1|x_1\rangle + \psi_2|x_2\rangle + \psi_3|x_3\rangle$$

Medimos a posição em $t = t_0 \dots$

Resultados possíveis:

- Autovalores de \hat{X} : $\{x_1, x_2, x_3\}$;
- Obteremos **apenas um** de entre $\{x_1, x_2, x_3\}$;

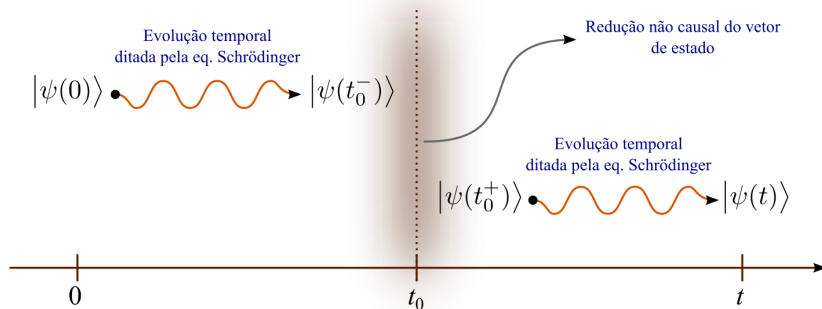
Suponhamos que obtivemos x_2 . Então, a $t = t_0^+$:

$$|\psi(t_0^+)\rangle = |x_2\rangle.$$

Se repetirmos a medição de \mathcal{X} **imediatamente a seguir**, obteremos x_2 com **certeza absoluta** porque $\mathcal{P}(x_2, t_0^+) = |\langle x_2 | \psi(t_0^+) \rangle|^2 = 1$.

Propriedade física \mathcal{A} é medida no instante t_0

sendo registado o valor a_n



$$|\psi(t_0^+)\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle \Psi(t_0^-) | \hat{P}_n | \Psi(t_0^-) \rangle}} \hat{P}_n |\psi(t_0^-)\rangle \quad (\text{caso geral})$$

$$|\psi(t_0^+)\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle u_n | u_n \rangle}} |u_n\rangle \quad (\text{se } a_n \text{ for não-degenerado})$$

Um exemplo: medição que resulta num autovalor degenerado

Recordemos o exemplo da observável \hat{A} introduzida na pág. 11:

$$A = \begin{bmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 4 & -1 \\ 1 & -1 & 4 \end{bmatrix} \longrightarrow \text{autovalores: } \begin{cases} a_1 = 6 & (g_1 = 1; \text{ não degenerado}) \\ a_2 = 3 & (g_2 = 2; \text{ duplamente degenerado}) \end{cases}$$

Um possível conjunto completo de autovetores ortonormais de \hat{A} é:

$$|a_1\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |a_2^{(1)}\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad |a_2^{(2)}\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Suponhamos que, na base **original** de posição $\{|x_1\rangle, |x_2\rangle, |x_3\rangle\}$, o vetor de estado é dado por

$$|\psi\rangle = \psi_1|x_1\rangle + \psi_2|x_2\rangle + \psi_3|x_3\rangle$$

Qual é a **probabilidade** de obtermos o valor 3 (o autovalor identificado como a_2) numa medição de \hat{A} ?

$$\mathcal{P}(a_n) = \langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle \implies \mathcal{P}(a_2 = 3) = \langle \psi | \hat{P}_2 | \psi \rangle$$

Mas

$$\hat{P}_2 \stackrel{\text{def.}}{=} \sum_{\alpha=1}^{g_2} |a_2^{(\alpha)}\rangle \langle a_2^{(\alpha)}| = |a_2^{(1)}\rangle \langle a_2^{(1)}| + |a_2^{(2)}\rangle \langle a_2^{(2)}|.$$

Então,

$$\mathcal{P}(a_2) = \langle \psi | \hat{P}_2 | \psi \rangle = \langle \psi | a_2^{(1)} \rangle \langle a_2^{(1)} | \psi \rangle + \langle \psi | a_2^{(2)} \rangle \langle a_2^{(2)} | \psi \rangle = |\langle a_2^{(1)} | \psi \rangle|^2 + |\langle a_2^{(2)} | \psi \rangle|^2.$$

Alem disso, de acordo com o postulado P6, imediatamente a seguir a esta medida devolver o resultado a_2 , ficará:

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\mathcal{A} \rightarrow a_2} \frac{1}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_2 | \psi \rangle}} \hat{P}_2 | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{|\langle a_2^{(1)} | \psi \rangle|^2 + |\langle a_2^{(2)} | \psi \rangle|^2}} \left[\langle a_2^{(1)} | \psi \rangle |a_2^{(1)}\rangle + \langle a_2^{(2)} | \psi \rangle |a_2^{(2)}\rangle \right]$$

Medições e reduções consecutivas do vetor de estado

Medição **subsequente** de uma **outra** propriedade \mathcal{B}

Possíveis resultados observáveis para \mathcal{B} :

- Autovalores de \hat{B} : $\{b_1, b_2, \dots\}$;
- Numa única medida de \mathcal{B} , obteremos **um** destes b_i .

Sabemos que a probabilidade de obter b_i é (P4):

$$\mathcal{P}(b_i, t_0^+) = |\langle w_i | \psi(t_0^+) \rangle|^2 = |\langle w_i | u_n \rangle|^2$$

onde

$$\hat{B}|w_i\rangle = b_i|w_i\rangle$$

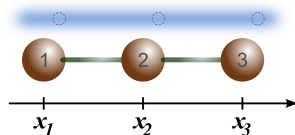
e $|\langle w_i | u_n \rangle|^2 \neq \delta_{in}$ em geral.

Portanto, se \mathcal{B} for medido **imediatamente** após obtermos o resultado a_n na medição de \mathcal{A} :

- $\mathcal{P}(b_i)$ é calculada **com o estado reduzido** após a medição de \mathcal{A} ;
- o resultado para \mathcal{B} é apenas previsível probabilisticamente;
- após a medição de \mathcal{B} devolver o resultado b_m , o vetor de estado é **novamente reduzido**, mas agora para o autoestado de \hat{B} associado a b_m :

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\mathcal{B} \rightarrow b_m} |w_m\rangle.$$

O nosso exemplo



$$|\psi(t_0^-)\rangle = \psi_1|x_1\rangle + \psi_2|x_2\rangle + \psi_3|x_3\rangle$$

Medimos a posição em $t = t_0 \dots$

Suponhamos que se obtém o resultado x_2 :

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\mathcal{X} \rightarrow x_2} |x_2\rangle$$

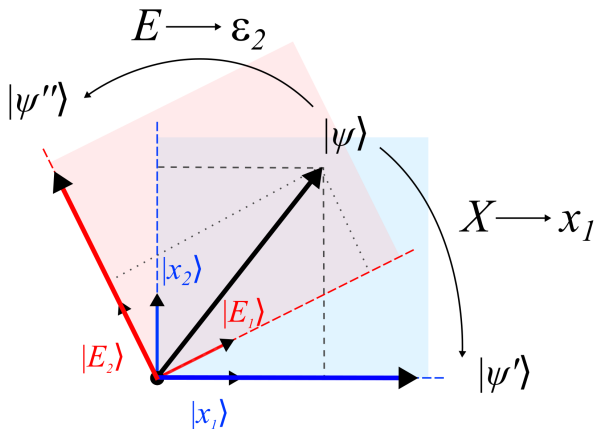
Se medirmos a energia **imediatamente a seguir**:

- o resultado será um de $\{E_1, E_2, E_3\}$;
- a probabilidade de obtermos cada E_i é

$$\mathcal{P}(E_i, t_0^+) = |\langle E_i | x_2 \rangle|^2;$$

- se obtivermos, por exemplo, o resultado E_3 :

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\mathcal{H} \rightarrow E_3} |E_3\rangle = \frac{1}{2}|x_1\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2}|x_2\rangle + \frac{1}{2}|x_3\rangle.$$



$$|\psi\rangle \xrightarrow{\mathcal{X} \rightarrow x_1} |\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_{\{x_1\}} | \psi \rangle}} \hat{P}_{\{x_1\}} |\psi\rangle$$

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\mathcal{E} \rightarrow E_2} |\psi''\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_{\{E_2\}} | \psi \rangle}} \hat{P}_{\{E_2\}} |\psi\rangle$$

Aspectos essenciais a reter:

- Qualquer medição tem o efeito de reduzir (projetar) o vetor de estado.
- Medir um conjunto de propriedades físicas em **sucessão imediata** implica, por ex.:

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\mathcal{A} \rightarrow a_n} \frac{1}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_{a_n} | \psi \rangle}} \hat{P}_{a_n} |\psi\rangle \xrightarrow{\mathcal{B} \rightarrow b_k} \frac{1}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_{b_k} | \psi \rangle}} \hat{P}_{b_k} \left(\frac{1}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_{a_n} | \psi \rangle}} \hat{P}_{a_n} \right) |\psi\rangle \dots$$

- A redução do vetor de estado no ato de cada medição reflete o facto de, no preciso momento da medição, passarmos a ter **nova e concreta informação** sobre o estado do sistema.
- Em geral,

$$\hat{P}_{a_n} \hat{P}_{b_k} \neq \hat{P}_{b_k} \hat{P}_{a_n}$$

pelo que a ordem das medições é relevante. Em tais casos, as observáveis em questão dizem-se **incompatíveis**.

- Observáveis incompatíveis não são passíveis de serem medidas em simultâneo com precisão arbitrariamente elevada.
- O ato de medir é a forma de preparar um sistema quântico num estado bem definido.