Aula 19 (11/Mar)

No aula de hoje:

* Revisão das aulas anteriores.
* Postulados da Mecânica Clássica.
* Postulados da Mecânica Quântica.
* Quantificação Canónica
* Variáveis compatíveis e incompatíveis.

— // —

Revisão da aula anterior

* Aula 16:
  - Observáveis e C.C.O.C.s.
  - Exemplos importantes: $\{|\vec{r}\rangle\}$ e $\{|\vec{p}\rangle\}$, $\hat{\vec{R}}$ e $\hat{\vec{P}}$.
* Aula 17: resolução exercícios Folha 4.
* Aula 18 (assíncrona):
  - Exemplos importantes: $\{|\vec{r}\rangle\}$ e $\{|\vec{p}\rangle\}$, $\hat{\vec{R}}$ e $\hat{\vec{P}}$.
  - Produto tensorial de espaços de estados

— // —

Capítulo (5): Postulados da Mecânica Quântica

Neste capítulo vamos enunciar os postulados da MQ (decorrentes das observações experimentais dos capítulos (2) e (3)), e vamos discutir as suas implicações.

(5.1) Postulados da Mecânica Clássica

Para N partículas clássicas pontuais podemos escrever:

(i) O estado do sistema em $t = t_0$ é definido especificando $\{q_i(t_0), p_i(t_0)\}$ com $i = 1, \ldots, N$ identificando as N partículas

(ii) Num dado instante, o valor de todas as quantidades físicas é completamente determinado se o estado do sistema é conhecido. Qualquer medida feita em t_0 tem resultado totalmente previsível.

(iii) A evolução do estado do sist é dado pelas eqçs Hamilton

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad , \quad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

onde H é o Hamiltoniano do sistema.

Nota: Estado conhecido para todo o t se conhecido para $t = t_0$! (pois eqçs diferenciais de primeira ordem).

5.2 Postulados da Mecânica Quântica

5.2.1) Como é descrito o sistema quântico?

Primeiro Postulado: Num dado instante t_0 o estado do sistema é descrito por ket $|\psi(t_0)\rangle$ pertencente ao espaço de estados $\mathcal{E}$.

Nota: Aqui temos princípio sobreposição, pois $\mathcal{E}$ é espaço vectorial!

Nota: Normalizabilidade do estado $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ (pois $\psi \in \mathcal{F} \subset L^2$).

5.2.2) Como prever resultado medição de uma quantidade física?

Segundo Postulado: A quantidade física mensurável, A, é descrita por operador $\hat{A}$, que actua em $\mathcal{E}$; esse operador é uma observável.

Nota: Diferente de MC. Em MQ estado e quantidade física são conceitos bem diferentes:

estado $\longrightarrow$ Ket

quant. física $\longrightarrow$ Operador

Terceiro Postulado: Os únicos resultados possíveis numa medição da quantidade física, A, são os auto-valores da observável $\hat{A}$ associada a A.

Nota: Se espectro $\hat{A}$ é discreto, resultados da medição estão quantizados. Se espectro $\hat{A}$ é contínuo, resultados de medição não são discretizados.

Nota: Resultado medição é número real, pois observável é operador hermítico.

Quarto Postulado: A previsão de resultado de medição de quantidade A é probabilístico. Se o estado sist. for dado por $|\psi\rangle$, então:

* Se $\hat{A}$ tem espectro discreto $\{a_n\}$, a probabilidade obter auto-valor a_{n_0} é

$\hookrightarrow \hat{A}|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle$

$$P(a_{n_0}) = \frac{1}{\langle\psi|\psi\rangle} \sum_{i=1}^{g_{n_0}} \left|\langle u_{n_0}^i|\psi\rangle\right|^2$$

onde g_{n_0} é degenerescência a_{n_0}, sendo $\{|u_n^i\rangle\}$ são base ortonormada do sub-espaço $\mathcal{E}_{n_0}$ associado a a_{n_0}.

$\hat{A}|u_\alpha^i\rangle = a(\alpha)|u_\alpha^i\rangle$

* Se $\hat{A}$ tiver espectro contínuo $\{a(\alpha)\}$,

a probabilidade obter resultado entre α_0 e $\alpha_0 + d\alpha$ é

$$d\mathcal{P}(\alpha_0) = \frac{1}{\langle\psi|\psi\rangle} \sum_{i=1}^{g(\alpha_0)} |\langle u^i_{\alpha_0}|\psi\rangle|^2 \, d\alpha$$

onde $|u^i_\alpha\rangle$ é auto-vec. associado ao auto-val. $a(\alpha)$, sendo que i identifica degenerescência (discreta).

Nota: Por consistência temos que ter que

$$\sum_n \mathcal{P}(a_n) = 1 \ , \quad \int d\mathcal{P}(\alpha) = 1 .$$

Nota: Se tivermos $|\psi'\rangle = e^{i\theta}|\psi\rangle$ ou $|\psi''\rangle = c \cdot e^{i\theta}|\psi\rangle$, teremos as mesmas $\mathcal{P}(a_n)$ e $d\mathcal{P}(\alpha)$. $\Rightarrow$ kets proporcionais descrevem o mesmo estado.

Nota: Mas se fases relativas $|\phi\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle$ e $|\chi\rangle = e^{i\theta_1}\lambda_1|\psi_1\rangle + e^{i\theta_2}\lambda_2|\psi_2\rangle$ teremos probabilidades diferentes (origem do fenómeno de interferência).

Quinto Postulado: Quando medimos o sistema, a f.o. colapsa. Se medição de $\hat{A}$ do sistema no estado $|\psi\rangle$ dá resultado:

* a_n (espectro discreto), imediatamente após a medição o estado do sist. será projeção normalizada de $|\psi\rangle$ no sub-espaço $\mathcal{E}_n$,

$$|\psi\rangle \xrightarrow[\text{dá } a_n]{\text{medição de } \hat{A}} \frac{\hat{P}_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\hat{P}_n|\psi\rangle}} ,$$

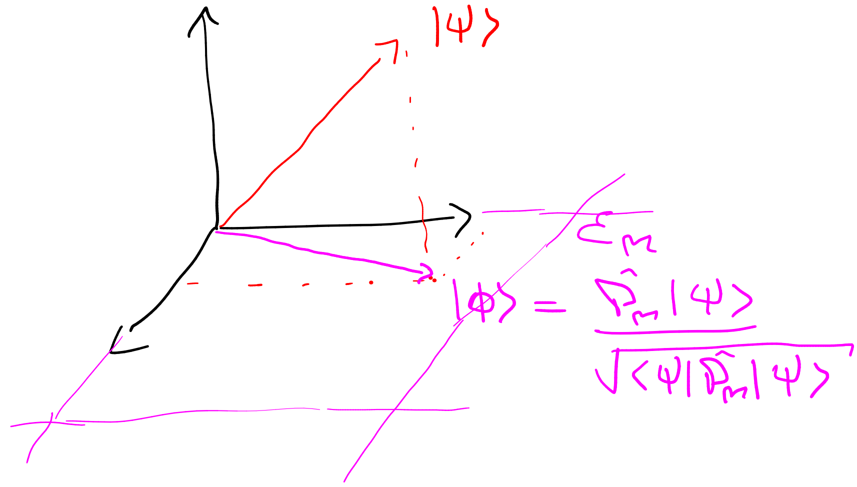
onde $P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i|$ é o projector no sub-espaço $\underline{\mathcal{E}_n}$ associado ao auto-val. $\underline{a_n}$.

* α_0 (espectro contínuo) com incerteza $\Delta\alpha$, imediatamente após a medição de $\hat{A}$, o estado do sistema será dado pela "projeção"

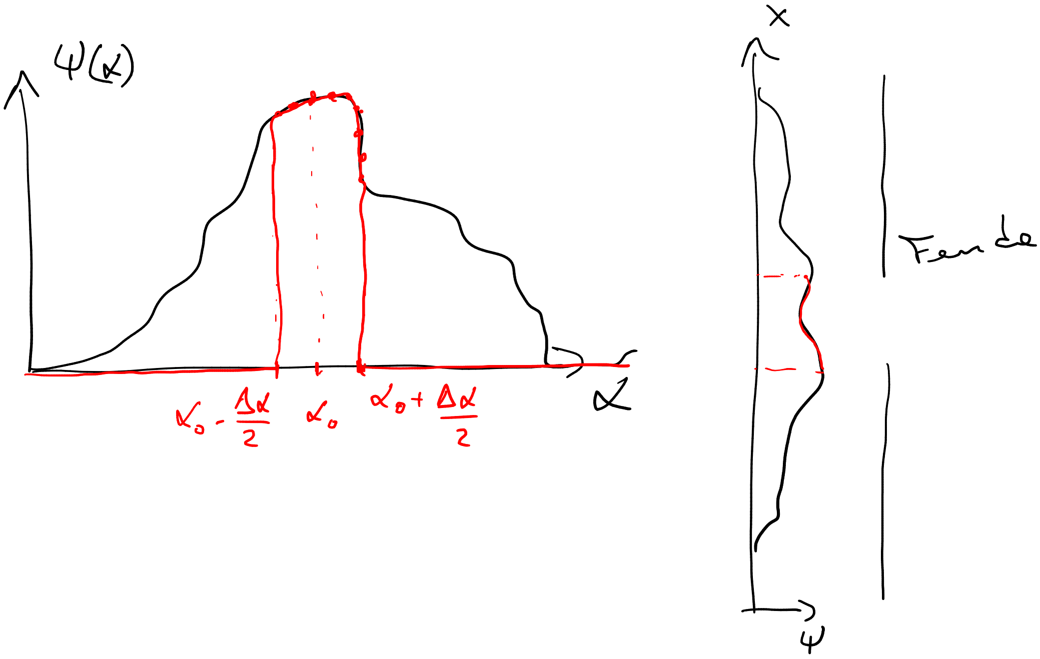
$$|\psi\rangle \xrightarrow[\text{com incerteza } \Delta\alpha]{\text{medida de } \hat{A} \text{ dá } \alpha_0} \frac{\hat{P}_{\Delta\alpha}(\alpha_0)|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\hat{P}_{\Delta\alpha}(\alpha_0)|\psi\rangle}}$$

onde $P_{\Delta\alpha}(\alpha_0) = \int_{\alpha_0-\Delta\alpha/2}^{\alpha_0+\Delta\alpha/2} d\alpha \, |u(\alpha)\rangle\langle u(\alpha)|$, projecto no sub-espaço correspondente aos auto-vectores associados ao conjunto de auto-vals $[\alpha_0 - \Delta\alpha/2 , \alpha_0 + \Delta\alpha/2]$.

Nota: Depois da medição o estado do sist. é auto-vec de $\hat{A}$. Mas não qq auto-vector.



Nota:



Nota: Se $[\hat{A}, \hat{H}] \neq 0$, não teremos base de auto-vectores comum e então $|\phi\rangle$ depois da medição evoluirá no tempo pois $|\phi\rangle$ não é auto-vec. de $\hat{H}$.

5.2.3) Como evolui um sistema quântico?

Controlado pela eq. Schr.

Sexto Postulado: Evolução temporal do estado $|\psi(t)\rangle$ é dado pela eq. de Schr.

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

onde $\hat{H}(t)$ é o observável associado à energia total do sist., o que Hamiltoniano

Como escreveremos $\hat{H}$ (ou qq outro $\hat{A}$) do Hamiltoniano (ou de qq outra grandeza física A) clássica?

5.3 Quantificação Canônica

Partícula sem spin num potencial. Se o estado clássico é dado por $\{\vec{r}(t), \vec{p}(t)\}$

então quantificação é feita:

(i) Estado do sist. passa a ser dado pelo ket $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ em vez de $\{\vec{r}, \vec{p}\}$.

(ii) Associamos a $\vec{r} \longrightarrow \hat{\vec{R}}$ e a $\vec{p} \longrightarrow \hat{\vec{P}}$ que são observáveis, sendo que uma grandeza física $A(\vec{r}, \vec{p}, t) \longrightarrow \hat{A}(\hat{\vec{R}}, \hat{\vec{P}}, t)$ onde quando houver ambiguidade de ordem entre $\hat{\vec{R}}$ e $\hat{\vec{P}}$ simetrizamos (garante hermiticidade).

(iii) Impomos relações comutação canônicas

$$[\hat{R}_i, \hat{R}_j] = 0 = [\hat{P}_i, \hat{P}_j]$$

$$[\hat{R}_i, \hat{P}_j] = i\hbar \hat{\mathbb{1}} . \delta_{ij}$$

Exemplo: A quantidade física $X.p_x$ corresponde ao operador

$$\frac{1}{2}\left(\hat{X}\hat{P}_x + \hat{P}_x\hat{X}\right)$$

Exemplo: $\mathcal{L} = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x) \xrightarrow{p = m\dot{x}} H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$

quantificando temos

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + V(\hat{X})$$

com relações comutação $[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar \mathbb{1}$.

Exemplo: Partícula num campo EMG

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2}\dot{\vec{r}}^2 + q\,\dot{\vec{r}} \cdot \vec{A}(t,\vec{r}) - q\,\phi(t,\vec{r})$$

$$\Big\Downarrow \quad \vec{p} = m\dot{\vec{r}} + q\vec{A}$$

$$H = \frac{\left[\vec{p} - q\vec{A}(t,\vec{r})\right]^2}{2m} + q \cdot \phi(t,\vec{r})$$

quantificando fica

$$\hat{H} = \frac{\left[\hat{\vec{P}} - q\hat{\vec{A}}(t,\hat{\vec{R}})\right]^2}{2m} + q \cdot \hat{\phi}(t,\hat{\vec{R}})$$

com relação comutação

$$[\hat{X}_i, \hat{P}_j] = i\hbar \mathbb{1}\, \delta_{ij}$$

5.7) Variáveis compatíveis e incompatíveis

Os postulados nada dizem acerca do princípio de incerteza de Heisenberg. Nesta secção iremos vê-lo emergir da não comutação de duas observáveis.

Definição: Duas grandezas físicas mensuráveis A e B dizem-se compatíveis se os seus operadores comutarem, $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Se $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ então A e B dizem-se grandezas incompatíveis.

Nota: Compatíveis $\longrightarrow$ CCOC.

5.4.1) Valor esperado de uma observável

Terceiro Postulado $\Rightarrow$ medição $\hat{A}$ terá resultados em.

Qual o valor esperado de medição de $\hat{A}$ quando sistema no estado $|\psi\rangle$?

↳ Repetiremos experiência N vezes, preparando o estado $|\psi\rangle$ e medindo A. Obteremos N_{a_n} vezes o resultado a_n. Poderemos escrever probabilidade de obter a_n como

$$\frac{N_{a_n}}{N} \xrightarrow{N\to\infty} \mathcal{P}(a_n)$$

⟶ dado pelo 4° postulado

onde $\sum_n N_{a_n} = N$. Assim, o valor esperado de medição de $\hat{A}$ será

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum_n a_n \frac{N_{a_n}}{N} \xrightarrow{N\to\infty} \sum_n a_n \mathcal{P}(a_n).$$

Do Quarto Postulado temos que

$$\mathcal{P}(a_n) = \frac{1}{\langle\psi|\psi\rangle} \sum_{i=1}^{g_n} \left|\langle u_n^i|\psi\rangle\right|^2$$

onde $\{|u_n^i\rangle\} \in \mathcal{E}_n$ são auto-vecs $\hat{A}$. Podemos então escrever

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum_n a_n \frac{1}{\langle\psi|\psi\rangle} \sum_{i=1}^{g_n} \left|\langle u_n^i|\psi\rangle\right|^2$$

$$= \sum_n \frac{a_n}{\langle\psi|\psi\rangle} \sum_i^{g_n} \langle\psi|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi\rangle$$

$$= \sum_n \frac{1}{\langle\psi|\psi\rangle} \sum_i^{g_n} \langle\psi|\hat{A}|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi\rangle$$

$$= \frac{1}{\langle\psi|\psi\rangle} \langle\psi|\hat{A} \underbrace{\left[\sum_n \sum_i^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i|\right]}_{= \hat{\mathbb{1}}} |\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle\hat{A}\rangle_\psi = \frac{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}} \rightarrow \text{Valor esperado de } \hat{A} \text{ no estado } |\psi\rangle.$$

Note: Análogo para $\hat{A}$ espectro contínuo.

Note: Na prática calculamos $\langle A\rangle_\psi$ usando uma representação particular, por ex.,

$$\langle\hat{P}_x\rangle \overset{\langle\psi|\psi\rangle=1}{=} \langle\psi|\hat{P}_x|\psi\rangle \overset{\{|\vec{r}\rangle\}}{=} \int d\vec{r}\, \langle\psi|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\hat{P}_x|\psi\rangle$$

$$= \int d^3\vec{r}\, \psi^*(\vec{r})\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(\vec{r})$$

Note: Frequentemente usamos $\langle\hat{A}\rangle$ em vez $\langle\hat{A}\rangle_\psi$.

5.4.2) Desvio padrão de observável

Desvio padrão está associado à dispersão dos resultados da medição de $\hat{A}$ (quando fazemos muitas repetições da experiência medindo $\hat{A}$). Notado por ΔA é dado por

$$(\Delta A)^2 \equiv \left\langle \left(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\psi\right)^2 \right\rangle_\psi = \left\langle \hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle \hat{A}\rangle + \langle \hat{A}\rangle^2 \right\rangle$$

$$= \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$$

Assim o desvio padrão de $\hat{A}$ é

$$\Delta A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2} .$$