

Quantização

matheus.coutinho9@usp.br

Versão Preliminar

Sumário

1	Motivação	3
2	Experimento de Stern-Gerlach	3
3	Quantização Canônica	7
4	Partícula Livre	10

1 Motivação

A forma de se resolver problemas associados a dinâmica e interação entre corpos, desenvolvida por Newton, nos permite, uma vez conhecidas as interações as quais o sistema está submetido e o seu estado inicial, prever a sua dinâmica. Identificamos as interações através das forças que agem sobre o sistema, ou o potencial, e a relacionamos com a alteração no estado de movimento do sistema, isto é

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = \mathbf{F} = -\nabla V \quad (1)$$

Pretendo nessa seção dar uma motivação para as profundas mudanças na forma de se pensar um problema de física nas escalas em que o protocolo clássico falha. A mecânica de Newton possui uma vastidão de aplicações e nos permite ter uma excelente compreensão dos fenômenos cotidianos, mas ela não tem sucesso em descrever a física de objetos muito velozes ou muito pequenos (escalas subatômicas), me concentrarei em desenvolver as bases da física de objetos microscópicos, a física Quântica. A mecânica quântica possui uma formulação consideravelmente mais complicada, esse texto tem por objetivo clarificar os modelos matemáticos, fundamentando-os com os resultados experimentais.

2 Experimento de Stern-Gerlach

As principais ferramentas matemáticas usadas na mecânica quântica serão desenvolvidas com base no Experimento de Stern-Gerlach. Conforme a figura abaixo, o experimento consiste no lançamento de átomos neutros em um campo magnético não-uniforme.

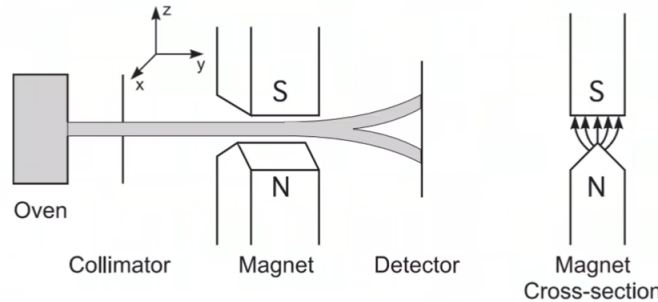


Figura 1: Caption

Como os átomos são neutros, espera-se um desvio leve em suas trajetórias, que é resultado da interação do momento de dipolo magnético do átomo com o campo não uniforme. O momento de dipolo magnético do elétron está diretamente relacionado ao momento angular. E a posição do elétron no detector está associado ao alinhamento do momento angular com o campo magnético.

Do ponto de vista clássico, o átomo poderia alcançar qualquer posição no detector, mas o que realmente se observar é que parte dos átomos é detectado na posição $+z$ e outra parte na posição $-z$, nenhuma alcançar uma posição intermediária, conforme se vê na figura abaixo

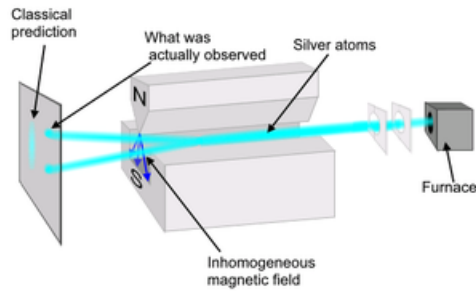


Figura 2: Caption

Esse resultado chama a atenção para o fato de que as grandezas físicas, no caso aqui o momento angular, podem ser discretas. Outra referência para essa possibilidade é a explicação para o efeito fotoelétrico proposta por Einstein e que lhe rendeu o prêmio Nobel de física de 1921, onde ele argumentou que a energia de um fóton, a partícula de luz, só pode ser múltipla de uma constante fundamental e da frequência de oscilação da onda associada a esse fóton

$$E = \hbar\omega \quad (2)$$

Atendemo-nos agora ao experimento de Stern-Gerlach, que demonstrou que o momento angular só pode ter componente $+z$ ou $-z$, isto é $L = \pm 1$

Os ingredientes básicos necessários para a formulação de um modelo que nos permita fazer presições em mecânica quântica são os seguinte enunciados

- O estado de um sistema é inteiramente caracterizado por um vetor $|\Psi\rangle$ no espaço de Hilbert \mathcal{H}
- Os observáveis físicos são representados por um operadores Hermitianos agindo no espaço de estados
- Os valores possíveis de se obter na medição de um observável são os autovalores associados aos operadores correspondentes
- A probabilidade de se fazer uma medição de um observável A e se obter o valor a_k , dado que o sistema encontra-se no estado $|\Psi\rangle$ é $|\langle a_k|\Psi\rangle|^2$

Dado um sistema física no estado $|\Psi\rangle$, podemos representá-lo numa base formada pelos autoestados de um observável qualquer, fazemos isso usando a relação de completeza da base dos autoestados

$$\sum_k |k\rangle \langle k| = \mathbb{1}$$

Inserindo a relação de completeza no estado $|\Psi\rangle$ obtemos $\mathbb{1} |\Psi\rangle = |\Psi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_k |k\rangle \langle k|\Psi\rangle = \langle k|\Psi\rangle |k\rangle$$

Definimos $c_k = \langle k|\Psi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_k c_k |k\rangle \quad (3)$$

Essa equação nos diz que o estado $|\Psi\rangle$ é uma superposição de vários estados possíveis ($|1\rangle, |2\rangle, \dots, |k\rangle$), ao fazer uma medição obteremos um autovalor associado a um desses estados, sendo que a probabilidade de se obter um valor associado a o estado $|k\rangle$ é $|c_k|^2 = |\langle k|\Psi\rangle|^2$

Pode ocorrer de um observável não ter um espectro discreto, isto é, existem um contínuo de valores possíveis de se obter ao medir esse observável, nesses casos a somatória deve ser substituída por uma integração. Um exemplo de observável de espectro contínuo é a posição X , então se quisermos escrever o estado do sistema como uma superposição de autoestados de posição nós usamos a seguinte relação de completeza

$$\int d\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| = \mathbb{1}$$

E a inserimos no estado $\mathbb{1} |\Psi\rangle = |\Psi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \int d\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|\Psi\rangle = \int d\mathbf{x} \langle \mathbf{x}|\Psi\rangle |\mathbf{x}\rangle$$

Agora o coeficiente $\langle \mathbf{x}|\Psi\rangle$ não pode ser escrito simplesmente como uma constante para cada índice \mathbf{x} , $c_{\mathbf{x}}$, mas sim como uma função de \mathbf{x} , já que \mathbf{x} é uma variável contínua, $\langle \mathbf{x}|\Psi\rangle = \Psi(\mathbf{x})$. A função $\Psi(\mathbf{x})$ é frequentemente chamada de função de onda do sistema

$$|\Psi\rangle = \int d\mathbf{x} \Psi(\mathbf{x}) |\mathbf{x}\rangle$$

De forma análoga a equação (3), a equação (4) nos diz que o estado $|\Psi\rangle$ é uma superposição de um contínuo de estados $|\mathbf{x}\rangle$ possíveis, e que ao fazer uma medição da posição do sistema obtemos um valor associado ao um desses estados, com a probabilidade de se obter um valor \mathbf{x}' associado ao estado $|\mathbf{x}'\rangle$ com probabilidade

$$\text{Prob}(\mathbf{x} = \mathbf{x}') = |\langle \mathbf{x}' | \Psi \rangle|^2 = |\Psi(\mathbf{x}')|^2$$

Multiplicando a equação (3) por $\langle \mathbf{x} |$, obtemos a projeção do estado $|\Psi\rangle$ na base de posição

$$\langle \mathbf{x} | \Psi \rangle = \sum_k c_k \langle \mathbf{x} | k \rangle$$

Denominamos o termo $\langle \mathbf{x} | k \rangle$ como a autofunção do estado $|k\rangle$ na base de posição, e representa a densidade de probabilidade de um sistema no estado $|k\rangle$ ter posição \mathbf{x} , $\langle \mathbf{x} | k \rangle = u_k(\mathbf{x})$

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_k c_k u_k(\mathbf{x}) \quad (4)$$

Um exemplo extremamente importante é o caso em que os estados $|n\rangle$ representa autoestados de momento

$$\mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = p' | \mathbf{p}' \rangle$$

Como o momento é em geral contínuo, representamos o estado do sistema como uma integral sobre os autoestados de momento

$$|\Psi\rangle = \int d\mathbf{p} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \Psi \rangle$$

$\langle \mathbf{p} | \Psi \rangle = \phi(p)$ representa a densidade de probabilidade de um sistema no estado $|\Psi\rangle$ ter momento \mathbf{p} , é uma quantidade análoga a função de onda mas agora no espaço de momento

$$|\Psi\rangle = \int d\mathbf{p} \phi(p) | \mathbf{p} \rangle$$

Agora projetamos na posição

$$\langle \mathbf{x} | \Psi \rangle = \int d\mathbf{p} \phi(\mathbf{p}) \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle$$

De forma análoga, denominamos o termo $\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle$ como a autofunção do estado $|\mathbf{p}\rangle$ na base de posição, e representa a densidade de probabilidade de um sistema no estado $|\mathbf{p}\rangle$ ter posição \mathbf{x} , $\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \Psi_p(\mathbf{x})$.

Por fim, obtemos uma expressão análoga a equação (4) para o caso em que a base $|n\rangle$ é uma base contínua de autoestados de momento

$$\Psi(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{p} \phi(\mathbf{p}) \Psi_p(\mathbf{x})$$

3 Quantização Canônica

Como já comentado, uma das radicais mudanças da mecânica clássica para a Quântica é que na Quântica os observáveis são descritos por operadores hermitianos atuando no espaço de estados. Na mecânica clássica os observáveis são quantidades que expressam alguma característica do estado de movimento do sistema, como o momento, posição e momento angular, ou alguma interação com o sistema, como o potencial, a força, ou a energia fornecida ao sistema. Essas quantidades de naturezas distintas se relacionam através das equações dinâmicas.

Na mecânica quântica é fundamental entender como os operadores agem nos estados, para assim determinar quais os valores possíveis de serem medidos e as probabilidades a eles associadas. Determinando a forma do operador somos capazes de conhecer os seus autoestados através da resolução de uma equação diferencial ou através de uma equação matricial, dependendo se o operador possui um espectro contínuo ou discreto.

Quando se fala de torna um sistema qualquer em um sistema quântico uma forma tradicional de se fazer isso é impondo as relações de comutação, esse método é chamado de quantização canônica.

$$[\mathbf{x}, \mathbf{p}] = i\hbar$$

Tentarei demonstrar a importância dessa relação, a partir dela será possível obter uma expressão para o operador \mathbf{p} e com isso determinar as autofunções de momento na base de posição $\Psi_p(\mathbf{x})$

Partindo da equação de autovalores de \mathbf{p}

$$\mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle = p |\mathbf{p}\rangle$$

Multiplicamos a equação pela identidade duas vezes

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{x}'' |\mathbf{x}''\rangle \langle \mathbf{x}''| \mathbf{p} \int d\mathbf{x}' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'| \mathbf{p} &= p \int d\mathbf{x}'' |\mathbf{x}''\rangle \langle \mathbf{x}''| \int d\mathbf{x}' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'| \mathbf{p} \\ \int d\mathbf{x}'' \int d\mathbf{x}' |\mathbf{x}''\rangle \langle \mathbf{x}''| \mathbf{p} |\mathbf{x}'\rangle \Psi_p(\mathbf{x}') &= p \int d\mathbf{x}'' \int d\mathbf{x}' |\mathbf{x}''\rangle \langle \mathbf{x}''| \mathbf{x}'\rangle \Psi_p(\mathbf{x}') \\ \int d\mathbf{x}'' \int d\mathbf{x}' |\mathbf{x}''\rangle \langle \mathbf{x}''| \mathbf{p} |\mathbf{x}'\rangle \Psi_p(\mathbf{x}') &= p \int d\mathbf{x}' \Psi_p(\mathbf{x}') |\mathbf{x}'\rangle \end{aligned}$$

O termo $\langle \mathbf{x}''| \mathbf{p} |\mathbf{x}'\rangle$ pode ser determinado através da relação de comutação

$$\langle \mathbf{x}''| [\mathbf{x}, \mathbf{p}] |\mathbf{x}'\rangle = \langle \mathbf{x}''| \mathbf{x} \mathbf{p} |\mathbf{x}'\rangle - \langle \mathbf{x}''| \mathbf{p} \mathbf{x} |\mathbf{x}'\rangle = i\hbar \delta(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')$$

$$\mathbf{x}'' \langle \mathbf{x}''| \mathbf{p} |\mathbf{x}'\rangle - \mathbf{x}' \langle \mathbf{x}''| \mathbf{p} |\mathbf{x}'\rangle = i\hbar \delta(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')$$

$$\langle \mathbf{x}''| \mathbf{p} |\mathbf{x}'\rangle = i\hbar \frac{\delta(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')}{\mathbf{x}'' - \mathbf{x}'} = -i\hbar \frac{d}{d\mathbf{x}} \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$$

Agora podemos substituir o termo $\langle \mathbf{x}''| \mathbf{p} |\mathbf{x}'\rangle$ na expressão anterior

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{x}'' \int d\mathbf{x}' |\mathbf{x}''\rangle \langle \mathbf{x}''| \mathbf{p} |\mathbf{x}'\rangle \Psi_p(\mathbf{x}') &= p \int d\mathbf{x}' \Psi_p(\mathbf{x}') |\mathbf{x}'\rangle \\ \int d\mathbf{x}' (-i\hbar) \frac{d}{d\mathbf{x}'} \Psi_p(\mathbf{x}') |\mathbf{x}'\rangle &= \int d\mathbf{x}' p \Psi_p(\mathbf{x}') |\mathbf{x}'\rangle \end{aligned}$$

Obtemos enfim uma equação diferencial para $\Psi_p(\mathbf{x})$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \Psi_p(\mathbf{x}) = p \Psi_p(\mathbf{x}) \quad (5)$$

É importante comentar que essa também é uma equação de autovalores e autovetores, mas, como o momento é uma variável contínua, o operador de momento não é uma matriz e sim um operador diferencial.

$$\mathbf{p}\Psi_p(\mathbf{x}) = p\Psi_p(\mathbf{x})$$

$$\mathbf{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}$$

De qualquer forma \mathbf{p} isso continua sendo um operador agindo em um espaço vetorial, só que em um espaço de funções.

Vemos que identificar o operador de momento como uma derivação e fornecer a relação de comutação $[\mathbf{x}, \mathbf{p}] = i\hbar$ são equivalentes, pois uma vez que o momento é identificado a relação de comutação pode ser derivada

$$\begin{aligned} [\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j]\Psi(\mathbf{x}) &= -i\hbar \left(\mathbf{x}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} \mathbf{x}_i \right) \Psi(\mathbf{x}) \\ [\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j]\Psi(\mathbf{x}) &= -i\hbar \left(\mathbf{x}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} \Psi(\mathbf{x}) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} \mathbf{x}_i \Psi(\mathbf{x}) \right) \\ [\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j]\Psi(\mathbf{x}) &= -i\hbar \left(\mathbf{x}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} \Psi(\mathbf{x}) - \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial \mathbf{x}_j} \Psi(\mathbf{x}) - \mathbf{x}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} \Psi(\mathbf{x}) \right) \\ [\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j]\Psi(\mathbf{x}) &= -i\hbar \left(-\frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial \mathbf{x}_j} \Psi(\mathbf{x}) \right) \\ [\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j]\Psi(\mathbf{x}) &= i\hbar \Psi(\mathbf{x}) \delta_{ij} \\ [\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j] &= i\hbar \delta_{ij} \end{aligned}$$

Agora a solução da equação (5) é trivial

$$\Psi_p(\mathbf{x}) = N e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} = N \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x} \right]$$

A constante N pode ser determinada facilmente usando a condição de normalização

$$\Psi_p(\mathbf{x}) = \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

ou

$$\Psi_p(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x} \right]$$

Podemos representar o sistema com momento definido como uma superposição de autoestados de posição

$$\begin{aligned} |\mathbf{p}\rangle &= \int d\mathbf{x}' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}' | \mathbf{p} \rangle \\ |\mathbf{p}\rangle &= \int d\mathbf{x}' \Psi_p(\mathbf{x}') |\mathbf{x}'\rangle \end{aligned}$$

Como já dito, o coeficiente da expansão do estado $|\mathbf{p}\rangle$ em termos de autoestados de posição está associada à densidade de probabilidade.

Se queremos saber a probabilidade de uma partícula com momento \mathbf{x} ser encontrada em uma região $\mathbf{x}, \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}$ fazemos

$$\text{Prob}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{x}}^{\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}} |\Psi_p(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}$$

$$\text{Prob}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbf{x}}^{\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}\right] d\mathbf{x}$$

$$\text{Prob}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbf{x}}^{\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}} d\mathbf{x}$$

$$\text{Prob}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \Delta\mathbf{x}$$

A probabilidade é constante! o que chama a atenção para o fato de que quando eu sei o momento da partícula a minha informação sobre a sua posição é mínima, pois a probabilidade é igual para qualquer região de mesmo tamanho, ou seja, a posição da partícula é totalmente indefinida.

Substituindo $\Psi_p(\mathbf{x})$ em

$$\Psi(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{p} \phi(\mathbf{p}) \Psi_p(\mathbf{x})$$

Temos

$$\Psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int d\mathbf{p} \phi(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}/\hbar}$$

Essa expressão se assemelha muito com a transformada de Fourier da função $\Psi(\mathbf{x})$ que é dada por

$$\Psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\mathbf{k} \phi(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}}$$

Portanto

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\mathbf{k} \phi(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int d\mathbf{p} \phi(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}/\hbar}$$

A última expressão nos fornece uma relação entre o momento e o vetor de onda \mathbf{k}

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$$

4 Partícula Livre