

## 2

### Fundamentos de Mecânica Quântica

Apresentaremos neste capítulo a notação e as noções básicas da Mecânica Quântica necessárias ao entendimento da dissertação. Uma abordagem mais detalhada destes conteúdos pode ser encontrada em livros específicos (4, 16, 21). Suporemos que o leitor já esteja familiarizado com os conceitos fundamentais de Álgebra Linear.

#### 2.1

##### A Necessidade de uma Nova Teoria

A Mecânica Clássica foi a primeira tentativa de descrever o comportamento mecânico de objetos. O conjunto formado pelas leis de movimento descobertas por Isaac Newton e pelas leis de campo, de James Maxwell, é extremamente simples e elegante, podendo ser aplicado na análise de uma enorme variedade de sistemas dinâmicos.

Entretanto, através de experimentos realizados no final do século XIX e no início do século XX, cientistas puderam observar que os conceitos da Mecânica Clássica eram inadequados para descrever eventos que ocorrem em escala atômica, ou seja, foi constatado um comportamento completamente não intuitivo na mecânica de objetos bem pequenos. A partir daí, iniciou-se a construção de uma nova teoria que descrevesse com exatidão o movimento de tais objetos.

A primeira contribuição ao formalismo da teoria quântica foi dada por Werner Heisenberg, em 1925 (12). A teoria de Heisenberg é conhecida atualmente como mecânica matricial, e muito dos detalhes e formalismos da teoria foi inserido ao longo do tempo por diversos físicos, como Pauli, Born, Dirac, Schrödinger e von Neumann.

##### 2.1.1

##### Critério para a Utilização da Teoria Quântica

Uma pergunta importante que nos preocupamos em responder é a seguinte: como determinar se um objeto é pequeno ou grande? Ou seja, como

sabermos se podemos analisar um sistema através das leis tão intuitivas da Mecânica Clássica ou se devemos evocar a Mecânica Quântica?

O que devemos lembrar é que ciência só diz respeito a coisas observáveis, e que só podemos observar um objeto se este sofrer alguma influência externa. Logo, a observação sempre vem acompanhada de alguma perturbação ao objeto observado. É natural então definir que um objeto é grande se a perturbação que provém da observação pode ser desconsiderada, e pequeno caso ocorra o contrário.

Entretanto, ao observarmos um sistema, sabemos que é possível reduzirmos a perturbação provocada, bastando para isso apenas sermos cuidadosos. Este fato faz com que nossos conceitos de “grande” e “pequeno” sejam relativos, pois tudo depende de como e o que estamos observando. Para elaborarmos um conceito preciso (8), consideraremos que existe um limite inferior para a perturbação a que expomos o sistema, o qual é inerente ao objeto e não pode ser ultrapassado nem mesmo com técnicas mais precisas de observação.

Assim, se o objeto observado é tal que seu limite de perturbação é insignificante, então afirmamos que ele é grande e pode ser analisado através dos conceitos clássicos. Caso contrário, o objeto é pequeno e a teoria quântica torna-se indispensável.

## 2.2

### Polarização da Luz e Superposição de Estados

Um sistema atômico geral é composto por partículas que possuem propriedades específicas (tais como massa, momento de inércia, etc.) e que interagem obedecendo às leis de força. Obviamente, existem inúmeros cenários de movimentos destes corpos que não desrespeitam tais leis. Cada um destes cenários é dito um *estado* do sistema.

Se pensarmos na Física Clássica, especificar um estado nada mais é do que dar valores numéricos a todas as coordenadas e velocidades das várias componentes do sistema em algum instante de tempo através de observações. No entanto, se o sistema em questão consistir de corpos pequenos (de acordo com o critério dado anteriormente), não será possível fornecer tantas informações, já que observações alteram o estado do sistema.

Para introduzirmos os conceitos e os princípios básicos da teoria quântica, um exemplo particularmente simples é o da polarização da luz (8, 21), o qual descreveremos a seguir.

Um feixe de luz proveniente, por exemplo, de um laser, consiste de ondas eletromagnéticas. Vamos considerar o caso mais simples, no qual uma onda deste tipo, com certa frequência, se propaga em uma direção fixa, digamos

o eixo  $x$ . Afirmamos que em cada ponto deste eixo haverá dois vetores perpendiculares a ele e também entre si. Um representa o campo elétrico, o outro, o campo magnético, mas para apresentarmos o conceito de polarização, vamos nos ater ao primeiro. É de fundamental importância perceber que, em instantes de tempo diferentes (isto é, em pontos distintos do eixo  $x$ ), os vetores associados ao campo elétrico não devem necessariamente apontar na mesma direção, basta que eles satisfaçam as restrições de perpendicularidade.

Ao projetarmos estes vetores no plano  $yz$ , seus pontos finais formarão uma elipse, a qual pode ser percorrida tanto na direção horária, como na anti-horária. Obviamente, estas elipses podem ter vários formatos, desde círculos até os casos degenerados, que são segmentos de reta. Ao especificarmos um dos formatos e uma direção para o movimento, teremos especificado uma das possíveis polarizações do campo eletromagnético. Assim, podemos ter polarizações circulares (horárias ou anti-horárias), lineares (em qualquer direção do plano  $yz$ ) ou elípticas, que são combinações das duas anteriores.

Como nosso objetivo é apenas apresentar os conceitos mais básicos da Mecânica Quântica, vamos estudar o caso mais simples, o do feixe de luz linearmente polarizado, o qual consiste de fótons que possuem todos a mesma polarização, ou seja, que oscilam na mesma direção. Para determinar um *estado de polarização* para tais fótons, basta que escolhamos uma direção qualquer no plano  $yz$ .

Suponha que temos um feixe deste tipo passando por uma placa polarizadora (comercialmente conhecida como placa Polaróide, presente em alguns óculos escuros). Esta tem a propriedade de deixar atravessar apenas a luz que é polarizada linearmente na direção paralela à sua direção característica. A eletrodinâmica clássica afirma que, se a direção for paralela, toda a luz passa pela placa polarizadora; se for perpendicular, todos os fótons são absorvidos; enquanto que se a direção de polarização fizer um ângulo  $\theta$  com a direção da placa polarizadora, então  $\cos^2\theta$  é a fração do feixe que atravessará a placa. No entanto, o que podemos prever sobre o comportamento de um único fóton linearmente polarizado que incida sobre esta placa?

Se sua direção de polarização for paralela ou perpendicular à direção característica da placa, então ele atravessará ou será absorvido, respectivamente, mas não é possível descrever com certeza qual será seu comportamento no terceiro caso, onde existe um ângulo  $\theta$  entre sua direção e a direção da placa, já que é impossível que uma parte do fóton passe e outra não. Na verdade, se repetirmos o experimento um número grande de vezes, o que *observaremos* é que o fóton atravessará o polarizador em uma fração  $\cos^2\theta$  do número total de vezes. Ou seja, a partícula tem *probabilidade*  $\cos^2\theta$  de passar e aparecer do

outro lado com polarização paralela à direção do polarizador, e probabilidade  $\sin^2\theta$  de ser absorvido.

É interessante notar que, ao realizarmos um experimento deste tipo, abandonamos o caráter determinístico da teoria clássica. De fato, o melhor que podemos obter é um conjunto com seus possíveis resultados, e a probabilidade de que cada um deles ocorra.

Neste experimento, destaca-se ainda o seguinte: quando fazemos com que um fóton incida sobre um polarizador, estamos sujeitando a partícula a uma *observação*, já que observamos se a polarização é paralela ou perpendicular à direção característica da placa polarizadora. Assim, se houver um ângulo  $\theta$  diferente de  $\pi/2$  entre as duas direções em questão, ao observarmos o sistema forçamos o fóton a passar de seu estado inicial para um dos estados finais possíveis: paralelo ou perpendicular. Isto confirma nossas considerações anteriores de que observações alteram estados. Além disso, não é possível prevermos com certeza qual será o estado final, apenas associar-lhes probabilidades de ocorrerem.

Se supormos agora que a direção de polarização do feixe de luz linearmente polarizado fizer um ângulo  $\varphi$  com a direção característica da placa, ao projetarmos os vetores associados ao campo elétrico no plano  $yz$ , sabemos que é sempre possível decompor cada um deles nas direções  $y$  e  $z$ . Se depois disso determinarmos ainda o campo resultante em cada um dos eixos, teremos transformado este feixe de luz em duas ondas planas superpostas, cujas direções de polarização são ortogonais entre si. Diremos então que o estado de um fóton pertencente a um feixe deste tipo é a *superposição de estados* descritos por duas direções perpendiculares de polarização.

## 2.3

### Postulados de Mecânica Quântica e Notação de Dirac

#### 2.3.1

##### Vetores

Pelas considerações feitas na seção anterior, podemos afirmar que um estado é uma descrição completa de um sistema físico em um instante de tempo particular. Caberá ao primeiro postulado que apresentaremos estabelecer o ambiente matemático onde tais sistemas quânticos são definidos:

**Postulado I:** *A qualquer sistema físico está associado um espaço de Hilbert, que será chamado espaço de estados. Seus estados são representados por raios de tal espaço, isto é, por classes de equivalência de vetores não-nulos que*

diferem por um escalar complexo diferente de zero.

De acordo com a notação de Dirac (8), padrão em Mecânica Quântica, um vetor não-nulo é representado por um *ket*,  $|\cdot\rangle$ . Usamos índices dentro do ket para identificá-lo: um vetor  $v$  é escrito como  $|v\rangle$ . Assim, por exemplo, se  $A$  é um operador, então  $Av$  é representado por  $A|v\rangle$ , embora a notação  $|Av\rangle$  também seja encontrada na literatura.

O postulado leva-nos à seguinte afirmação: cada estado de um sistema quântico em um certo instante de tempo corresponde a um ket, de tal forma que se o vetor é multiplicado por qualquer número complexo diferente de zero, o vetor resultante ainda representará o mesmo estado. Vale também ressaltar que se um estado é obtido através da superposição de outros estados, podemos escrever seu ket como combinação linear dos kets correspondentes aos outros estados.

### 2.3.2 Funcionais Lineares

Se  $V$  é o espaço vetorial dos kets, sabemos que seu espaço dual,  $V^*$ , é formado pelos funcionais lineares de  $V$ . Os elementos deste novo conjunto são dados, de acordo com a representação de Riesz, por  $(v, \cdot)$ , onde  $v$  é um vetor pertencente a  $V$ . A notação de Dirac para funcionais lineares é  $\langle \cdot |$ , o qual chamaremos *bra*.

Podemos ainda definir a notação para o produto interno entre dois vetores  $\langle w |$  e  $|v\rangle$ . Tal operação será escrita como  $\langle w|v\rangle$ , e este símbolo é dito um *bracket*.

Kets, bras e operadores lineares podem ser multiplicados livremente, desde que respeitemos o seguinte: valem os axiomas de associatividade e distributividade da multiplicação, mas não a comutatividade. Levando em conta as definições anteriores, é possível afirmar que qualquer expressão que comece com  $\langle$  e termine com  $\rangle$  representa um número. Caso contrário, o bracket está incompleto, e a expressão representa um vetor ou um funcional.

Já vimos o significado físico de bras e kets: as direções desses vetores correspondem a estados de um sistema quântico em instantes de tempo particulares. Consideraremos então que operadores lineares representam variáveis dinâmicas do sistema, tais como velocidade, momentos de inércia e angular das partículas, etc.

É interessante agora que apresentemos um dicionário, o qual identificará a notação matemática que nos é habitual com os símbolos utilizados pelos físicos, introduzidos ao longo desta e da seção anterior. Assim:

Matemático	Físico
$v$	$ v\rangle$
$(v, \cdot)$	$\langle v $
$(v, w)$	$\langle v w\rangle$
$(v, Aw)$	$\langle v A w\rangle$
$(v, \cdot)w$	$ w\rangle\langle v $
$A^*$	$A^\dagger$

### 2.3.3 Evolução

O seguinte postulado descreve a evolução temporal de um estado  $|\psi\rangle$  de um sistema quântico:

**Postulado II:** *A evolução de um sistema quântico isolado é descrito por uma transformação unitária. Isto é, o estado  $|\psi\rangle$  do sistema no tempo  $t_1$  é relacionado ao estado  $|\psi'\rangle$  do sistema no tempo  $t_2$  por um operador unitário  $U$ , o qual depende somente de  $t_1$  e  $t_2$ ,*

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle.$$

Notemos que este postulado não define qual o operador que descreve a evolução de cada estado, apenas nos assegura que a evolução de qualquer sistema quântico isolado pode ser descrita de tal maneira. Por *sistema isolado* devemos considerar qualquer um que não interage com outros sistemas.

Na seção seguinte obteremos meios para descrever sistemas não-fechados como, por exemplo, qualquer um que sofra algum processo de observação.

### 2.3.4 Medições e Observáveis

Nosso objetivo agora é estabelecer critérios para responder a seguinte questão: que grandezas são observáveis na física quântica?

Quando fazemos uma observação, estamos medindo alguma variável de um sistema dinâmico. Obviamente, sempre obtemos como resultado um número real, então poderíamos afirmar que toda variável dinâmica que pode ser medida é uma variável real. Tentar aplicar tal procedimento a uma variável complexa, medindo separadamente suas partes real e imaginária, não é uma boa idéia, pois teríamos que realizar duas observações. Embora isto não gere problemas na Física Clássica, o cenário é diferente quando tratamos de sistemas quânticos: não podemos realizar duas medições simultaneamente, e mesmo que

estas sejam feitas rapidamente, uma após a outra, a primeira perturbará o estado, afetando o resultado da segunda.

Nesta dissertação, estaremos interessados em grandezas que só podem tomar um número finito de valores,  $\{a_1, \dots, a_n\}$ . Suporemos inicialmente também que o estado  $|e_j\rangle$  (representado por um vetor unitário), para o qual a grandeza toma o valor  $a_j$ ,  $j = 1, \dots, n$ , é único. Ou seja, se considerarmos um estado  $|v\rangle$  qualquer de um sistema, as grandezas não tomarão em geral valores definidos: isso só acontece nos estados  $|e_j\rangle$ . De um modo geral, uma grandeza  $A$  tomará um de seus valores possíveis  $\{a_1, \dots, a_n\}$  em cada observação e haverá probabilidades (dadas pelo próximo postulado) para cada um desses valores:

**Postulado III:** *Se um sistema é preparado num estado  $|v\rangle$ , a probabilidade de que a medida de uma grandeza produza o resultado  $a_j$  (portanto, que o sistema seja observado no estado  $|e_j\rangle$ ) é*

$$p_j = |\langle e_j | v \rangle|^2, \quad j = 1, \dots, n. \quad (2-1)$$

Ao fazermos uma pergunta do tipo: “O valor da grandeza  $A$  no estado  $|e_j\rangle$  é  $a_k$ ?”, obtemos resposta “sim” se  $j = k$ , e “não” se  $j \neq k$ . Utilizando então o postulado anterior, somos levados à seguinte formulação:

*Se um sistema é preparado no estado  $|e_j\rangle$ , a probabilidade de que a medida da grandeza produza o resultado  $a_k$  (portanto, que o sistema seja observado no estado  $|e_k\rangle$ ) é*

$$p_{jk} = |\langle e_k | e_j \rangle|^2 = \delta_{jk}, \quad j, k = 1, \dots, n$$

onde

$$\delta_{jk} = \begin{cases} 1 & \text{se } j = k \\ 0 & \text{se } j \neq k \end{cases} .$$

Assim, se escolhermos convenientemente as fases dos vetores-estado, poderemos afirmar que estes formam um conjunto ortonormal, ou seja, que  $\langle e_k | e_j \rangle = \delta_{jk}$ . Juntamente com o fato óbvio de que num espaço vetorial de dimensão  $n$  não podem existir mais do que  $n$  vetores ortonormais, uma observação interessante que se pode fazer é a seguinte: o número máximo de valores que uma grandeza observável pode tomar é a dimensão do espaço de estados em questão. Ou seja, a restrição que fizemos para o número de valores possíveis para tais grandezas é equivalente a afirmar que os espaços de Hilbert com os quais trabalhamos devem ter dimensão finita.

Vamos agora obter mais informações sobre os operadores lineares que

representam variáveis dinâmicas de um sistema. Por um abuso de notação, denotaremos por  $A$  o operador linear que representa a grandeza  $A$ . O valor médio de  $A$  no estado  $|v\rangle$  é dado pelo seguinte:

$$\langle A \rangle_u = \sum_{j=1}^n p_j a_j .$$

Substituindo nesta expressão as probabilidades dadas por (2-1), obtemos:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_u &= \sum_{j=1}^n a_j |\langle e_j | v \rangle|^2 \\ &= \sum_{j=1}^n a_j \overline{\langle e_j | v \rangle} \langle e_j | v \rangle \\ &= \sum_{j=1}^n a_j \langle v | e_j \rangle \langle e_j | v \rangle \\ &= \langle v | A | v \rangle , \end{aligned}$$

onde

$$A = \sum_{j=1}^n a_j P_j , \tag{2-2}$$

com

$$P_j = |e_j\rangle \langle e_j| , j = 1, \dots, n .$$

O operador  $A$  é unicamente determinado pela fórmula de polarização. Além disso, como os números  $a_j$  são todos reais e os operadores  $P_j$  são auto-adjuntos, pela eq. (2-2) podemos afirmar que operadores lineares associados a grandezas observáveis são sempre auto-adjuntos, ou seja, que  $A = A^\dagger$ .

Desta forma reconhecemos a expressão (2-2) como sendo a decomposição espectral do operador  $A$ . De fato, como  $\langle e_j | e_i \rangle = \delta_{ij}$ , temos

$$A |e_i\rangle = a_i |e_i\rangle , i = 1, \dots, n ,$$

ou seja,  $|e_i\rangle$  é um autovetor de  $A$  associado ao autovalor  $a_i$ .

Assim, analisando um sistema quântico em qualquer estado, os possíveis resultados da medição de uma variável real observável são os autovalores do operador auto-adjunto associado a ela.

Além disso, os estados para os quais uma grandeza observável  $A$  assume com certeza (probabilidade igual a 1) seus valores possíveis  $\{a_1, \dots, a_n\}$  são os autovetores correspondentes ao operador  $A$  que lhe é associado.

O caso mais geral ocorre quando o estado correspondente a um valor medido não é único. Este será tratado pelo seguinte postulado, o qual também

ilustra o fato já conhecido de que observações alteram estados:

**Postulado IV:** *Se uma medição obtém como resultado um valor  $a_j$  pertencente ao espectro do operador  $A$  associado à grandeza observada, então o estado do sistema passa de um estado inicial  $|\psi\rangle$  para  $P_j|\psi\rangle$ , onde  $P_j$  é o projetor espectral associado ao autovalor  $a_j$ . Assim, se repetirmos o procedimento imediatamente após a medição, teremos ainda  $a_j$  como resultado, pois  $P_j|\psi\rangle$  é ele próprio um autovetor de  $A$  com autovalor  $a_j$ .*

Dizemos que o operador  $A$  que representa uma medição é não-degenerado se suas projeções espectrais têm posto 1.

Vimos no Postulado II que os estados quânticos podem sofrer mudanças por operadores unitários e, no Postulado IV, por projeções. É um outro postulado da Mecânica Quântica que combinações destes tipos de transformações são as únicas fisicamente realizáveis:

**Postulado V:** *As únicas operações fisicamente realizáveis sobre estados quânticos (representados por vetores não-normalizados) são:*

1. *Unitários  $\psi \mapsto U\psi$ ,*
  2. *Projeções  $\psi \mapsto P\psi$  realizáveis por medições,*
- e as composições dos dois tipos.*

Para sistemas associados a espaços de Hilbert de dimensão finita, é geralmente aceito que qualquer operador unitário é fisicamente realizável e que qualquer operador auto-adjunto representa uma medição fisicamente realizável.

É importante observar que as duas transformações acima são ambas *lineares*, portanto os estados quânticos só podem ser manipulados por transformações lineares.