

Fundamentos de teoria quântica

Fundamentos matemáticos da mecânica clássica

Rafael Rabelo – rabelo@ifi.unicamp.br

Departamento de Física da Matéria Condensada
Instituto de Física “Gleb Wataghin”
Universidade Estadual de Campinas

Estado é o nome dado ao objeto matemático que descreve as propriedades de um sistema físico em determinado instante de tempo.

A todo sistema físico de n graus de liberdade está associado um *espaço de fase*:

$$\Gamma = \{(q_k, p_k) | k = 1, \dots, n\} = \{r_k | k = 1, \dots, n\} = \{r\}, \quad (1)$$

onde q_k e p_k são as coordenadas canonicamente conjugadas do k -ésimo grau de liberdade.

Um *estado puro* de um sistema individual é descrito por um ponto no espaço de fase, \bar{r} .

O estado mais geral de um sistema é um *estado misto*, descrito por uma função distribuição de probabilidades $\rho : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}_+$ sobre o espaço de fase do sistema:

$$\rho = \left\{ \rho(r) \mid r \in \Gamma, \rho(r) \geq 0, \int \rho(r) dr = 1 \right\}. \quad (2)$$

A função distribuição de um estado puro é

$$\rho_{\text{puro}}(r) = \delta(r - \bar{r}). \quad (3)$$

Uma *operação* sobre um sistema é representada por um mapa linear M que leva cada estado $\rho(r)$ a um novo estado $M\rho(r)$.

A fim de preservar as propriedades da função distribuição de probabilidades, M deve ser um mapa positivo e preservar norma.

A evolução dinâmica de um sistema fechado é governada pelo seu Hamiltoniano $H(r)$ por meio da *equação de Liouville*:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \{\rho, H\} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial\rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial\rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right), \quad (4)$$

onde $\{\cdot, \cdot\}$ denota os *colchetes de Poisson*.

A função distribuição de probabilidades é constante ao longo de qualquer trajetória no espaço de fase:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \{\rho, H\} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial\rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial\rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = 0. \quad (5)$$

O teorema de Liouville implica que a evolução do sistema é regida por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\{\rho, H\} = -\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right). \quad (6)$$

Para estados puros, a equação de Liouville se reduz às *equações de Hamilton*:

$$\frac{d\bar{r}}{dt} = -\{\bar{r}, H\} = \begin{cases} \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{cases}, \forall i \in \{1, \dots, n\}. \quad (7)$$

A evolução do sistema de um estado inicial $\rho(r, 0)$ a um estado final $\rho(r, t)$, regida pela equação de Liouville, pode ser vista como resultado da aplicação de um operador inversível $M(t)$ ao estado inicial:

$$\rho(r, t) = M(t)\rho(r, 0). \quad (8)$$

Considere uma partição $\Gamma_x = \{P_{a|x}\}$ do espaço de fase. A cada parte $P_{a|x}$, associe uma *função indicadora* $\Pi_{a|x}(r)$:

$$\Pi_{a|x}(r) = \begin{cases} 1, & \text{se } r \in P_{a|x}, \\ 0, & \text{senão.} \end{cases} \quad (9)$$

As funções indicadoras de uma partição formam um conjunto completo de funções disjuntas par-a-par:

$$\sum_a \Pi_{a|x}(r) = 1, \quad \Pi_{a|x}(r)\Pi_{a'|x}(r) = \delta_{a,a'}\Pi_{a|x}(r). \quad (10)$$

Em uma *medição projetiva* x do sistema, a cada parte $P_{a|x}$ de uma partição $\Gamma_x = \{P_{a|x}\}$ do espaço de fase associa-se um resultado a da medição por meio da função indicadora $\Pi_{a|x}$.

Se a medição x é realizada sobre um sistema cujo estado é descrito pela função $\rho(r)$, o resultado a ocorre com probabilidade

$$p(a|x) = \int_{\Gamma} \Pi_{a|x}(r)\rho(r)dr, \quad (11)$$

onde $\Pi_{a|x}(r)$ é a função indicadora da parte $P_{a|x}$.

Realizada uma medição projetiva x sobre um sistema no estado $\rho(r)$, o estado do sistema após a realização da medição, assumindo-se que o resultado a foi observado, é denotado $\rho_{a|x}(r)$ e obtido por meio da regra de Bayes

$$\rho_{a|x}(r) = \frac{\Pi_{a|x}(r)\rho(r)}{p(a|x)}. \quad (12)$$

Medições projetivas são *repetíveis*: se a mesma medição projetiva é realizada duas vezes, em sequência, o resultado da segunda medição será idêntico ao da primeira.

Suponha que a uma medição projetiva x é realizada sobre um sistema no estado $\rho(r)$. Algum resultado é obtido, mas, por alguma razão, não sabe-se qual. Seja $\rho_x(r)$ o estado do sistema após a medição. Sua melhor descrição é dada por uma média sobre os estados pós-medição para cada um dos possíveis resultados, ponderada por suas respectivas probabilidades:

$$\rho_x(r) = \sum_a p(a|x) \frac{\Pi_{a|x}(r)\rho(r)}{p(a|x)} = \rho(r). \quad (13)$$

Um *observável* é uma função $A : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$ que representa uma *propriedade física* do sistema.

Todo observável $A(r)$ pode ser expandido, de forma arbitrariamente boa, por meio de funções indicadoras associadas a uma partição $\Gamma_x = \{P_{a|x}\}$ do espaço de fase:

$$A(r) = \sum_a A_a \Pi_{a|x}(r). \quad (14)$$

Os possíveis valores de $A(r)$ são elementos do conjunto $\{A_a\}$.

A medição de um observável é realizada através da medição projetiva associada à sua expansão em funções indicadoras, associando-se o resultado A_a do observável ao resultado a da medição.

O *valor esperado* de um observável $A(r)$ em um sistema cujo estado é $\rho(r)$ é dado por

$$\langle A \rangle = \sum_a p(a|x) A_a = \int_{\Gamma} A(r) \rho(r) dr. \quad (15)$$

Em uma *medição não-projetiva* x , ou *medição generalizada* x , associa-se cada possível resultado a a uma função não-negativa $E_{a|x} : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}_+$, denominada *efeito*, de forma que

$$\sum_a E_{a|x}(r) = 1. \quad (16)$$

Medições projetivas são casos particulares de medições generalizadas.

Se uma medição generalizada x é realizada sobre um sistema cujo estado é descrito pela função $\rho(r)$, o resultado a ocorre com probabilidade

$$p(a|x) = \int_{\Gamma} E_{a|x}(r)\rho(r)dr. \quad (17)$$

Realizada uma medição generalizada x sobre um sistema no estado $\rho(r)$, o estado do sistema após a realização da medição, assumindo-se que o resultado a foi observado, é denotado $\rho_{a|x}(r)$ e obtido por meio da regra de Bayes

$$\rho_{a|x}(r) = \frac{E_{a|x}(r)\rho(r)}{p(a|x)}. \quad (18)$$

Ao contrário das medições projetivas, medições generalizadas não são, em geral, repetíveis.

O espaço de fase de um sistema composto de subsistemas A e B é o *produto cartesiano* dos espaços de fase dos subsistemas:

$$\Gamma_{AB} = \Gamma_A \times \Gamma_B = \{(r_A, r_B)\}. \quad (19)$$

O estado de um sistema composto é descrito por uma função distribuição normalizada $\rho_{AB} : \Gamma_{AB} \rightarrow \mathbb{R}_+$, que depende de ambos os pontos de fase r_A e r_B :

$$\rho_{AB} = \left\{ \rho_{AB}(r_A, r_B) \mid \rho_{AB}(r_A, r_B) \geq 0, \int_{\Gamma_{AB}} \rho_{AB}(r_A, r_B) dr_A dr_B = 1 \right\}. \quad (20)$$

O *estado reduzido* de uma das partes é obtido por marginalização sobre as demais:

$$\rho_A(r_A) = \int_{\Gamma_B} \rho_{AB}(r_A, r_B) dr_B, \quad (21)$$

$$\rho_B(r_B) = \int_{\Gamma_A} \rho_{AB}(r_A, r_B) dr_A, \quad (22)$$

onde $\rho_A(r_A)$ e $\rho_B(r_B)$ denotam os estados reduzidos das partes A e B , respectivamente.

Se o estado do sistema composto é um *estado produto*, igual ao produto dos estados reduzidos dos subsistemas,

$$\rho_{AB}(r_A, r_B) = \rho_A(r_A) \rho_B(r_B), \quad (23)$$

então os sistemas A e B são ditos *independentes*.

Em geral, os subsistemas A e B estão *correlacionados*. O estado do sistema composto é sempre *separável*, e pode ser escrito como combinação convexa de estados produto:

$$\rho_{AB}(r_A, r_B) = \sum_i p(i) \rho_A(r_A|i) \rho_B(r_B|i), \quad (24)$$

onde $p(i) \geq 0$ e $\sum_i p(i) = 1$.

O estado de um sistema composto evolui de acordo com a equação

$$\frac{\partial \rho_{AB}(r_A, r_B)}{\partial t} = -\{\rho_{AB}(r_A, r_B), H_{AB}(r_A, r_B)\}, \quad (25)$$

onde $H_{AB}(r_A, r_B)$ é o Hamiltoniano do sistema composto.

Em geral, o Hamiltoniano do sistema composto é a soma dos Hamiltonianos dos subsistemas, mais um *Hamiltoniano de interação*:

$$H_{AB}(r_A, r_B) = H_A(r_A) + H_B(r_B) + H_{\text{int}}(r_A, r_B). \quad (26)$$

A dinâmica do sistema composto é reversível, mas, em geral, a *dinâmica reduzida* de um subsistema não.

Seja $\rho_{AB}(r_A, r_B, t)$ o estado evoluído do sistema composto. Então

$$\rho_A(r_A, t) = \int_{\Gamma_B} \rho_{AB}(r_A, r_B, t) dr_B = M_A(t) \rho_A(r_A, 0), \quad (27)$$

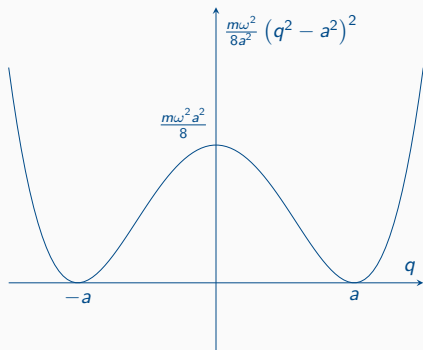
onde $M_A(t)$ é o mapa de evolução do subsistema A – em geral, não inversível – e $\rho_A(r_A, 0)$ é seu estado inicial.

Discretização

Considere um sistema com um único grau de liberdade, possuindo o seguinte Hamiltoniano:

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{8a^2} (q^2 - a^2)^2. \quad (28)$$

A energia potencial do sistema é:



Se a energia do sistema é muito menor que a barreira, então o movimento do sistema está restrito a pequenas regiões nos entornos de $q = \pm a$. Neste sentido, o sistema tem, efetivamente, dois únicos estados.

O espaço de fase do sistema pode, portanto, ser aproximado, ou restrito, a um conjunto discreto de dois elementos, $\Gamma = \{0, 1\}$, onde o valor $r = 0$ é associado ao estado no entorno de $q = -a$, e o valor $r = 1$ ao estado no entorno de $q = a$.

Os estados puros de um *bit* são $\{\delta_{r0}, \delta_{r1}\}$.

Um estado misto ρ de um *bit* é dado por uma distribuição de probabilidades sobre os estados puros:

$$\rho = \{p(r) | r \in \{0, 1\}\}. \quad (29)$$