

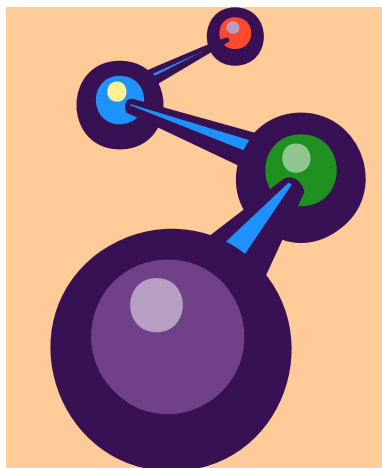
MECÂNICA QUÂNTICA

FORMALISMO

(Parte 2)

Parte de notas de aulas relacionadas à disciplina FIS 660-Mecânica Quântica do curso de Mestrado em Física da Universidade Federal de Viçosa durante os anos de 2001 a 2005. O conteúdo é equivalente a aproximadamente 6 aulas. O texto é baseado no livro “Modern Quantum Mechanics” de J.J. Sakurai, adotado nessa disciplina durante o período acima mencionado.

Prof. Afrânio Rodrigues Pereira
Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa,
Viçosa, 36570-000, Minas Gerais.
Email: apereira@ufv.br



FÍSICA QUÂNTICA I

(Aulas 8 e 9: Medidas e Observáveis)

6.1 MEDIDAS

Já desenvolvemos a matemática do espaço-ket e agora estamos prontos para discutir a teoria quântica dos processos de medida. Um dos objetivos primários de um experimento é determinar informação suficiente sobre o estado de um sistema, em um dado instante de tempo, para capacitar a previsão do comportamento subsequente do sistema. Isto é, nós gostaríamos de medir observáveis suficientes em um tempo t_M para sermos capazes de prever a evolução do sistema em $t > t_M$.

No entanto, em mecânica quântica, tais previsões são impossíveis, a não ser que saibamos o que a medida pode fazer com o estado KET (lembre-se do primeiro postulado: o estado KET contém toda a informação sobre o sistema físico). Diferente do físico clássico, o físico quântico tem que conviver com uma inevitável interação **observador- observado** que pode ser resumida na seguinte regra: é impossível realizar uma medida sobre um sistema microscópico que não perturbe o sistema de uma maneira significativa, imprevisível e incontrolável.

A definição de medida sobre um sistema microscópico é tão crucial para o nosso presente interesse que faremos uma discussão mais detalhada. Uma idéia central para a interpretação da mecânica quântica é o conceito de **“ensemble” de sistemas microscópicos**. A palavra inglesa “ensemble” significa conjunto. Um “ensemble” é uma coleção contendo um número muito grande de sistemas idênticos e que não interagem, todos preparados no mesmo estado quântico. Sistemas individuais em um “ensemble” são denominados **membros**. Assim, de acordo com o primeiro postulado, qualquer estado do “ensemble” pode ser representado por um KET $|\alpha\rangle$. Aqui nós consideraremos apenas “ensembles” nos quais todos os membros podem ser caracterizados pelo mesmo KET $|\alpha\rangle$. Tal “ensemble” é denominado **ensemble puro**. Para exemplificar um ensemble puro, podemos usar o já badalado experimento de Stern-Gerlach. Um feixe de átomos de prata que sobrevive ao primeiro aparato SG-z com a componente S_z -bloqueada é um bom exemplo de ensemble puro, pois todos os átomos do feixe (existem muitos átomos no feixe e cada átomo é um membro) são caracterizados pelo mesmo KET $|S_z; +\rangle$.

Quando falamos em “uma medida de um observável A no instante de tempo t_A ”, queremos dizer que realizamos uma medida simultânea de A sobre todos os membros do ensemble. Sabemos que a medida deve mudar o estado do sistema. Agora podemos nos perguntar: o que muda em um sistema, quando realizamos uma medida de um observável A? Seguindo Dirac, respondemos: “Uma medida sempre fará com que o sistema salte para um dos autoestados da variável dinâmica que está sendo medida”. Assim, antes que uma medida de um observável A seja feita, assumimos que o sistema seja representado por alguma combinação linear dos autokets de A, como segue

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle . \quad (6.1)$$

Quando a medida é realizada, o sistema é atirado em um dos autoestados (autokets), digamos $|a'\rangle$, do observável A. Em símbolos,

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{medida de A}} |a'\rangle$$

No experimento Stern-Gerlach, um átomo de prata do feixe que sai do forno com orientação de spin arbitrária (que é um sistema físico) mudará para $|S_z ; + \rangle$ ou $|S_z ; - \rangle$ quando passar por um aparato do tipo SG-z. Logo, a medida usualmente muda o estado. A única exceção a essa regra aparece quando o estado já estava em dos autoestados do observável que está sendo medido. Nesse caso

$$|a'\rangle \xrightarrow{\text{medida de A}} |a'\rangle$$

Quando a medida muda $|\alpha\rangle$ em $|a'\rangle$, dizemos que o resultado da medida de A é a' .

Dado a expressão (6.1), que representa o estado KET de um sistema físico antes da medida, não poderemos saber de antemão em qual dos vários $|a'\rangle$'s o sistema será atirado como resultado da medida. A teoria quântica poderá nos dar uma resposta apenas probabilística, isto é, poderemos saber a probabilidade do sistema ser encontrado, após a medida, em algum $|a'\rangle$ particular. Com isso em mente, introduzimos o terceiro e o quarto postulados da mecânica quântica:

Terceiro Postulado: O único resultado possível de uma medida de um observável físico representado pelo operador A é um dos autovalores desse operador.

Quarto Postulado: Quando um observável físico é medido em um sistema descrito pelo KET normalizado $|\alpha\rangle$, a probabilidade de encontrarmos um autovalor a' do correspondente operador A é $|\langle a' | \alpha \rangle|^2$, onde $|a'\rangle$ é um autoket normalizado de A associado ao autovalor a' .

Agora fica claro porque definimos um ensemble contendo um grande número de sistemas físicos idênticos. A razão está na interpretação probabilística resumida no quarto postulado. Se estamos falando em probabilidade, então temos que fazer muitos experimentos idênticos para testarmos as previsões da teoria. Com isso em mente, fica surpreendentemente fácil ver que uma medida deve mudar o estado do sistema. Imagine que queremos medir um observável representado por um operador A. Suponha que o arranjo experimental é tal que o estado antes da medida não seja um auto-estado de A, i.e., existe uma incerteza com relação ao observável A, que denotaremos por ΔA (mais tarde definiremos tal incerteza). Em termos de um ensemble, essa condição significa que em um instante antes da medida, os membros do ensemble não têm um valor definido para o observável; nessa situação, seus estados podem ser os vários possíveis valores do observável, qualquer um dos quais pode aparecer na medida. Esses valores, agora sabemos, estão entre os autovalores do operador A. Agora pense

sobre o que acontece ao ensemble quando medimos o observável A: cada membro exibe um dos possíveis autovalores de A. Após a medida, cada membro exibirá um autovalor de A, o valor que ele exibe na medida, e assim estará em um auto-estado de A. Mais tarde faremos uma análise crítica da estrutura da teoria apresentada até agora.

Obviamente a probabilidade para o acontecimento de qualquer coisa deve ser não negativa. Mais ainda, as probabilidades para as várias possibilidades alternativas devem ser adicionadas à unidade. Ambas essas expectativas estão contidas no quarto postulado.

Iremos agora definir o **valor esperado de A tomado com respeito a $|\alpha\rangle$** , como segue:

$$\langle A \rangle_\alpha \equiv \langle \alpha | A | \alpha \rangle. \quad (6.2)$$

A expressão acima é uma definição. No entanto ela concorda com a nossa noção intuitiva de “valor médio”, pois

$$\langle A \rangle_\alpha \equiv \langle \alpha | A | \alpha \rangle = \sum_{a'} \sum_{a''} \langle \alpha | a' \rangle \langle a'' | A | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle = \sum_{a'} a' |\langle a' | \alpha \rangle|^2. \quad (6.3)$$

Note que no último termo, temos o valor medido a' , multiplicado pela probabilidade de obtê-lo. Basicamente temos uma média ponderada, onde os coeficientes de ponderação são as probabilidades.

Observação: não confundir autovalores com valor esperado.

Para exemplificar todo esse formalismo, usaremos novamente o sistema de dois estados que temos analisado ao longo do curso, i.e., o sistema de spin $\frac{1}{2}$. Nossa análise anterior só nos levou à expressão e autokets do operador S_z . Os resultados do experimento de Stern-Gerlach em seqüência combinados com os postulados da mecânica quântica discutidos até agora são suficientes para determinarmos também os autokets e expressões para os operadores S_x e S_y . Veja a figura abaixo!

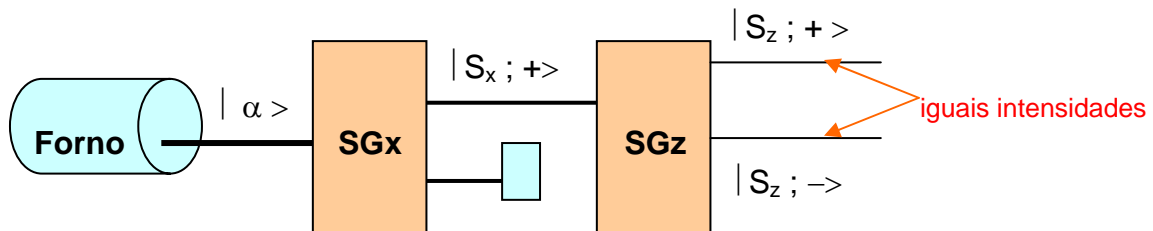


Fig. 6.1. Experimento de Stern-Gerlach em seqüência. O autoket $|S_x; -\rangle$ foi bloqueado.

Este resultado experimental mostra que a probabilidade do estado $|S_x; +\rangle$ ser atirado em $|S_z; \pm\rangle$ (que denotaremos por $|\pm\rangle$ como anteriormente) é $\frac{1}{2}$. Logo, usando o formalismo matemático escrevemos esse resultado experimental como

$$|\langle + | S_x; + \rangle| = |\langle - | S_x; - \rangle| = 1/\sqrt{2} \quad (6.4)$$

Lembrete: $\langle \beta | \alpha \rangle$ pode ser lido como a amplitude de probabilidade de um determinado sistema que está no estado $|\alpha\rangle$ ser atirado (por algum aparato de medida) em um estado $|\beta\rangle$.

Com o experimento esquematizado na figura (6.1) e a expressão (6.4) em mãos perguntamos: quais os autokets $|S_x; +\rangle$ e $|S_x; -\rangle$? Se o feixe $|S_x; +\rangle$ se divide em dois feixes $|S_z; +\rangle$ e $|S_z; -\rangle$ com iguais intensidades, então podemos escrevê-lo como uma combinação linear de $|S_z; +\rangle$ e $|S_z; -\rangle$ (usaremos a representação $|+\rangle$ e $|-\rangle$ para esses dois autokets de S_z) da seguinte forma:

$$|S_x; +\rangle = a |+\rangle + b |-\rangle, \quad \text{com} \quad |a| = |b|. \quad (6.5)$$

Mas a teoria nos diz que $\langle S_x; + | S_x; + \rangle = 1$, onde $\langle S_x; + | = a^* \langle + | + b^* \langle - |$. Sendo os autokets $|+\rangle$ e $|-\rangle$ ortonormais e usando (6.5) temos

$\langle S_x; + | S_x; + \rangle = aa^* \langle + | + \rangle + a^* b \langle + | - \rangle + b^* a \langle - | + \rangle + bb^* \langle - | - \rangle = 1$, ou $|a|^2 + |b|^2 = 1$, ou ainda $2|a|^2 = 1 \rightarrow |a| = |b| = 1/\sqrt{2}$. Lembrando que a e b são números complexos, podemos então escrever

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_1} \quad \text{ou} \quad a = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_1}, \quad (6.6)$$

onde δ_1 é um número Real. Usando o fato de que a fase não tem importância física, escolhemos o coeficiente do autoket $|+\rangle$ como sendo Real e positivo por convenção. Assim

$$|S_x; +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_1} |-\rangle. \quad (6.7)$$

O ket $|S_z; -\rangle$ deve ser ortogonal a $|S_z; +\rangle$, visto que eles são mutuamente exclusivos. Esse requerimento nos leva a

$$|S_x; -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_1} |-\rangle, \quad (6.8)$$

onde novamente o coeficiente de $|+\rangle$ foi escolhido Real e positivo. Com (6.7) e (6.8) em mãos podemos rapidamente construir uma expressão para o operador S_x bastando usar a equação (5.26). De (5.26) temos

$S_x = \frac{\hbar}{2} [|S_x; +\rangle \langle S_x; +| - |S_x; -\rangle \langle S_x; -|]$, e após usarmos (6.7) e (6.8) obtemos:

$$S_x = \frac{\hbar}{2} [e^{-i\delta_1} |+\rangle \langle -| + e^{i\delta_1} |-\rangle \langle +|]. \quad (6.9)$$

Note que, como esperado, S_x é Hermitiano. A prova já foi feita em sala de aula, mas seria interessante que você demonstrasse isso novamente. Um argumento similar ao anterior com S_x trocado por S_y leva a

$$|S_y; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_2} |-\rangle, \quad (6.10)$$

e

$$S_y = \frac{\hbar}{2} [e^{-i\delta_2} |+\rangle\langle -| + e^{i\delta_2} |-\rangle\langle +|]. \quad (6.11)$$

Nossa solução ainda não está completa, pois não conhecemos os números Reais δ_1, δ_2 que aparecem nas expressões (6.7) a (6.11). Para determinarmos tais constantes devemos usar uma informação ainda não explorada, a saber, a invariância dos sistemas físicos sob rotações. Os resultados dos experimentos de Stern-Gerlach em seqüência seriam análogos aos da figura (6.1) se giramos o campo magnético que aponta ao longo de z, por 90° , fazendo-o apontar ao longo da direção y (ver fig. (6.2)).

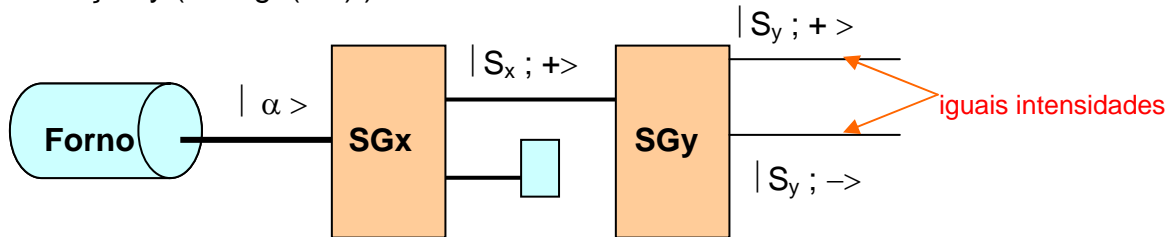


Fig. 6.2: invariância das leis físicas com relação a rotações.

Aqui também teremos:

$$\langle S_y; \pm | S_x; + \rangle = \langle S_y; \pm | S_x; - \rangle = 1/\sqrt{2}. \quad (6.12)$$

Usando (6.8) e (6.10) e inserindo em (6.12) obtemos:

$$\frac{1}{2} |1 \pm e^{i(\delta_1 - \delta_2)}| = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (6.13)$$

A equação acima tem solução somente se $\delta_1 - \delta_2 = \pm\pi/2$. Fica fácil ver então que os elementos de matriz de S_x, S_y não podem ser Reais. Se um deles for Real, o outro deve ser puramente Imaginário. Esse exemplo mostra novamente que a introdução de números Complexos em mecânica quântica é uma característica essencial. Com o resultado (6.13), é conveniente escolhermos S_x como Real e usar $\delta_1 = 0$. O segundo angulo de fase δ_2 deve então ser $\pm\pi/2$. Mas ainda existe uma ambigüidade e isso não é surpresa. Quando escolhemos $\delta_1 = 0$, especificamos apenas as direções \hat{x} e \hat{z} , mas não a direção \hat{y} , i.e., não especificamos o sistema de coordenadas. A escolha $\delta_2 = \pi/2$ é consistente com o sistema de coordenadas tradicionalmente usado, esquematizado abaixo.

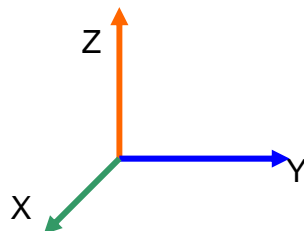


Fig.6.3: Sistema de coordenadas consistente com nossas convenções.

Abaixo fazemos um quadro resumindo o que deduzimos até agora, escrevendo as expressões para os operadores S_x e S_y , além de seus autokets na base de S_z . Lembramos novamente que todos os resultados se basearam no experimento de Stern-Gerlach e nos postulados da mecânica quântica.

Resumo

$$|S_x; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle$$

$$|S_y; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle,$$

$$S_x = \frac{\hbar}{2} [|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|].$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} [-i|+\rangle\langle-| + i|-\rangle\langle+|].$$

Os operadores S_{\pm} definidos por $S_+ \equiv \hbar|+\rangle\langle-|$ e $S_- \equiv \hbar|-\rangle\langle+|$ podem também ser escritos em termos de S_x e S_y como segue

$$S_{\pm} \equiv S_x \pm iS_y. \quad (6.14)$$

Essas relações podem ser facilmente verificadas usando o quadro acima.

Agora iremos definir algumas relações que serão extremamente importantes em nosso curso. Primeiro definiremos o comutador de dois operadores A e B:

$$[A, B] \equiv AB - BA. \quad (6.15)$$

O anticomutador é definido como:

$$\{A, B\} \equiv AB + BA. \quad (6.16)$$

Para o nosso sistema de Spin $\frac{1}{2}$ é fácil checar que :

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk} \hbar S_k, \quad (6.17)$$

e

$$\{S_i, S_j\} = \frac{1}{2} \hbar^2 \delta_{ij}. \quad (6.18)$$

Para fecharmos todos os operadores que podemos trabalhar nesse sistema de dois estados, podemos definir mais um operador Hermitiano como segue

$$\vec{S}^2 = \vec{S} \cdot \vec{S} \equiv S_x^2 + S_y^2 + S_z^2. \quad (6.19)$$

Esse operador é associado ao quadrado do momento angular de spin. Usando a relação de anticomutação (6.18), vemos facilmente que

$$\vec{S}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2, \quad (6.20)$$

isso é, para sistemas de spin $\frac{1}{2}$ o operador \vec{S}^2 é uma constante vezes o operador identidade. Sendo assim esse operador comuta com as três componentes de spin S_x , S_y e S_z , ou seja

$$[\vec{S}^2, S_i] = 0. \quad (6.21)$$

No final do curso, mostraremos que para sistemas de spin maior que $\frac{1}{2}$, \vec{S}^2 não será múltiplo do operador identidade. Entretanto, a relação (6.21) continuará válida.

Note que a equação (6.20) pode ser escrita como $\vec{S}^2 = s(s+1)\hbar^2$, onde $s=1/2$. Assim, embora classicamente pensaríamos que o maior valor possível da componente-z (ou qualquer outra componente) de \vec{S} seja exatamente S —isto é, $\sqrt{\vec{S} \cdot \vec{S}}$ —em mecânica quântica o máximo de S_z será sempre um pouco menor que S , pois $s\hbar$ (ou seja, $\hbar/2$) é sempre menor que $\sqrt{s(s+1)}\hbar = \sqrt{3}\hbar/2$. “O momento angular não está nunca apontando completamente ao longo da direção-z”!

PROBLEMAS

1. Mostre que os operadores S_z , S_x e S_y , têm as seguintes representações por matrizes: $S_z \doteq \frac{\hbar}{2} \sigma_z, S_x \doteq \frac{\hbar}{2} \sigma_x, S_y \doteq \frac{\hbar}{2} \sigma_y$, onde as matrizes $\sigma_z, \sigma_x, \sigma_y$ são as matrizes de Pauli dadas por:

$$\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}; \quad \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}.$$

Algumas vezes usaremos os índices 1, 2 e 3 para x, y e z respectivamente. Obtenha as relações de comutação entre esses operadores usando essa representação.

2. Vocês já podem fazer praticamente todos os problemas do livro envolvendo espaços KET discretos. Obs: nos problemas 2 e 3 aparecem as matrizes de Pauli.

3. Problema Resolvido (Livro texto Sakurai , pagina 61, problema 9)

Encontre $|S, n; + \rangle$ tal que

$$S \cdot \hat{n} |S, \hat{n}; + \rangle = (\hbar/2) |S, \hat{n}; + \rangle$$

onde \hat{n} é caracterizado pelos ângulos α, β (mostrados na figura do livro , pag. 62) . Expresse sua resposta como uma combinação linear de $|+\rangle$ e $|-\rangle$.

Solução : \hat{n} é um vetor unitário arbitrário, apontando em certa direção do espaço físico tridimensional. Desta forma podemos escrever $\hat{n} = n_x \hat{i} + n_y \hat{j} + n_z \hat{k}$, com $n_x = \text{sen } \beta \cos \alpha$, $n_y = \text{sen } \beta \text{sen } \alpha$, $n_z = \cos \beta$. Sendo $\vec{S} = S_x \hat{i} + S_y \hat{j} + S_z \hat{k}$, temos: $\vec{S} \cdot \hat{n} = \text{sen } \beta \cos \alpha S_x + \text{sen } \beta \text{sen } \alpha S_y + \cos \beta S_z$. Mas o ket $|\mathbf{S} \cdot \hat{n}; + \rangle$ também pode ser expandido em termos da base de S_z , $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, ou seja $|\mathbf{S} \cdot \hat{n}; + \rangle = a|+\rangle + b|-\rangle$, onde $|a|^2 + |b|^2 = 1$ (condição de normalização). Assim, lembrando que $S_x = (\hbar/2)(|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|)$, $S_y = (i\hbar/2)(-|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|)$ e $S_z = (\hbar/2)(|+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -|)$, temos

$$\mathbf{S} \cdot \hat{n} |\mathbf{S} \cdot \hat{n}; + \rangle = (\hbar/2) |\mathbf{S} \cdot \hat{n}; + \rangle$$

ou

$$(\text{sen } \beta \cos \alpha S_x + \text{sen } \beta \text{sen } \alpha S_y + \cos \beta S_z)(a|+\rangle + b|-\rangle) = (\hbar/2)(a|+\rangle + b|-\rangle)$$

da qual obtemos as seguintes relações:

$$(\text{sen } \beta \cos \alpha - i \text{sen } \beta \text{sen } \alpha)b + (\cos \beta)a = a \quad (1)$$

$$(\text{sen } \beta \cos \alpha + i \text{sen } \beta \text{sen } \alpha)a - (\cos \beta)b = b \quad (2)$$

O complexo da primeira equação do sistema acima é $(\text{sen } \beta \cos \alpha + i \text{sen } \beta \text{sen } \alpha)b^* + (\cos \beta)a^* = a^*$. Multiplicando essa equação por \underline{a} e a equação (2) por \underline{b}^* , temos

$$(\text{sen } \beta \cos \alpha + i \text{sen } \beta \text{sen } \alpha)b^* a + (\cos \beta)|a|^2 = |a|^2 \quad (3)$$

$$(\text{sen } \beta \cos \alpha + i \text{sen } \beta \text{sen } \alpha)a b^* - (\cos \beta)|b|^2 = |b|^2 \quad (4)$$

Subtraído (3) e (4) e usando a condição de normalização, vem $|a|^2 - |b|^2 = \cos \beta$. Usando novamente a condição de normalização, obtemos

$|a|^2 = (\cos \beta + 1)/2$, ou $a = \cos(\beta/2)e^{i\theta}$. (Aqui usamos a identidade $\cos(\beta/2) = [(\cos \beta + 1)/2]^{1/2}$ e o fato de \underline{a} ser complexo. Desta forma $b = \text{sen}(\beta/2)e^{i\nu}$. Precisamos determinar as fases θ, ν . É fácil ver da equação (1) que \underline{a} também pode ser escrito como

$$a = [(\text{sen } \beta)e^{-i\alpha}]b/(1 - \cos \beta). \text{ Usando os valores obtidos de } \underline{a} \text{ e } \underline{b}, \text{ isto é, } a = \cos(\beta/2)e^{i\theta}, \quad b = \text{sen}(\beta/2)e^{i\nu}, \text{ vem}$$

$$e^{i\alpha} = e^{i(\nu - \theta)}, \text{ isto é, } \alpha = \nu - \theta. \text{ Escolhendo } \theta = 0 \text{ segue } \nu = \alpha. \text{ Logo}$$

$$|\mathbf{S} \cdot \hat{n}; + \rangle = \cos(\beta/2)|+\rangle + \text{sen}(\beta/2)e^{i\alpha}|-\rangle.$$

Fim do problema 9 do livro texto.

4- Mostre que, se L e M são operadores Hermitianos, então os operadores

$$F = (1/2)(LM + ML) \text{ e } G = (i/2)(LM - ML),$$

também são Hermitianos.

5- Para os operadores L e M satisfazendo a condição $LM - ML = I$, encontre $LM^2 - M^2L$.

6- Para os operadores L e M satisfazendo a condição $LM - ML = I$, (ver problema 5), encontre $f(L)M - Mf(L)$, onde $f(L)$ é uma função qualquer do operador L .

7- PROBLEMA RESOLVIDO: (mais uma colher de chá ! Livro texto Sakurai, página 62, problema 10).

O operador Hamiltoniano para um sistema de dois estados é dado por

$$\mathbf{H} = a(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|),$$

onde a é um número com unidade de energia. Encontre os autovalores e os correspondentes autokets de energia (como combinação linear de $|1\rangle$ e $|2\rangle$).

SOLUÇÃO: neste espaço bidimensional, a base é formada pelos autokets de algum operador Hermitiano sendo dada por $\{|1\rangle, |2\rangle\}$. Este conjunto é ortonormal. Fica claro que esta base não é a base de H (basta apenas olhar a expressão para o operador H). Como queremos calcular os autovalores e autovetores de H , devemos considerar a seguinte equação:

$$H|\Psi\rangle = e|\Psi\rangle, \quad (1)$$

onde e representa os autovalores e $|\Psi\rangle$ representa os autokets. Pelo formalismo matemático da Mecânica Quântica podemos expandir $|\Psi\rangle$ em uma combinação linear da base. Assim, escrevemos

$$|\Psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle. \quad (2)$$

Com a condição de que $|\Psi\rangle$ seja normalizado ($\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$), temos $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$. Vamos primeiro obter os autovalores e_1 e e_2 . Usando a definição do operador H dada no problema e as Eqs. (1) e (2), temos:

$$a(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|) \cdot (c_1|1\rangle + c_2|2\rangle) = e c_1|1\rangle + e c_2|2\rangle. \quad (3)$$

Fazendo o produto explicitamente, obtemos duas equações do tipo:

$$a(c_1 + c_2) = e c_1, \quad a(c_1 - c_2) = e c_2. \quad (4)$$

Lembrando que os números a e e são Reais, pois estão relacionados com os autovalores da energia (o operador H é Hermitiano), podemos escrever as equações (4) tomando suas complexas conjugadas:

$$a(c_1^* + c_2^*) = e c_1^*, \quad a(c_1^* - c_2^*) = e c_2^*. \quad (5)$$

Multiplicando a primeira das Eqs. (4) com a primeira das Eqs. (5) e a segunda das Eqs. (4) com a segunda das Eqs. (5) e usando $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$, obtemos outras duas equações da forma:

$$a^2[1 + c_1 c_2^* + c_2 c_1^*] = e^2 |c_1|^2, \quad a^2[1 - c_1 c_2^* - c_2 c_1^*] = e^2 |c_2|^2. \quad (6)$$

Somando as equações (6), obtemos os dois autovalores de H : $e = \pm \sqrt{2} a$. Para determinarmos os correspondentes autovetores, podemos usar qualquer uma das equações (4). Usando a primeira, temos:

$$a(c_1 + c_2) = e c_1 \Rightarrow c_1(a - e) = -a c_2. \text{ Para o primeiro autovalor } e = \sqrt{2} a, \text{ segue } c_1(a - \sqrt{2} a) = -a c_2, \text{ ou}$$

$$c_1 = c_2 / (\sqrt{2} - 1). \text{ Usando novamente } |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1, \text{ podemos obter } c_1 \text{ e } c_2 \text{ que substituídos na Eq.(2) levam a}$$

$$|\Psi_1\rangle = (2(2 - \sqrt{2}))^{-1/2} (|1\rangle + (\sqrt{2} - 1)|2\rangle), \text{ para } e = \sqrt{2} a. \text{ Da mesma forma}$$

$$|\Psi_2\rangle = (2(2 + \sqrt{2}))^{-1/2} (|1\rangle - (\sqrt{2} + 1)|2\rangle), \text{ para } e = -\sqrt{2} a. \text{ Tentem fazer este mesmo problema usando a representação por Matrizes!}$$

Fim do problema 10 do livro texto.

8. Dado os operadores (matrizes de Pauli)

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

prove as seguintes relações:

(a) $\sin(\sigma_x \varphi) = \sigma_x \sin \varphi$;

(b) $\cos(\sigma_z \varphi) = \cos \varphi$.

9. Encontre as autofunções e autovalores para os operadores σ_x e σ_y .

Os problemas a seguir envolvem espaços contínuos que vocês começarão a estudar na aula de 09/04/2000 (isto é, na aula em que essa lista será entregue . Portanto, podem colocar a mão na massa!)

10. Encontre as relações de comutação para os seguintes operadores:

$$(a) x \text{ e } \frac{d}{dx}; \quad (b) i\hbar \vec{\nabla} \text{ e } \vec{A}(\vec{r}); \quad (c) \frac{\partial}{\partial \varphi} \text{ e } f(r, \theta, \varphi).$$

11. Encontre a relação explícita para os seguintes operadores:

$$(a) \left(\frac{d}{dx} + x \right)^2; \quad (b) \left(x \frac{d}{dx} \right)^2.$$

12. Ache o operador translação que mapeia $\psi(x)$ em $\psi(x+a)$.

A Estrutura da Mecânica Quântica (resumos e comentários)

Anteriormente, tivemos a oportunidade de ver quatro postulados da Mecânica Quântica. Falta ainda um postulado e o objetivo dessa seção será colocá-los todos juntos e fazer uma análise crítica da teoria. O postulado que está faltando poderia ser colocado como o terceiro e então mudaríamos a ordem estabelecida no nosso raciocínio inicial. Trata-se do postulado que determina a evolução temporal, isto é, a dinâmica do Ket, introduzido no primeiro postulado. Mas antes de apresentarmos definitivamente a estrutura da mecânica quântica, vamos rever alguns conceitos primitivos que são comuns em teorias físicas. Em geral, o assunto de uma teoria é denominado sistema físico, o qual toma o lugar do que ordinariamente chamamos "coisa". Um sistema pode consistir de muitas partes; sistemas de uma única parte são chamados simples (individual). O estado de um sistema físico nos dá um resumo abstrato de todas as suas características num tempo específico sem se comprometer com qualquer tipo específico de caracterização. Caracterizações definidas são feitas pelas variáveis dinâmicas. Pode existir muitas variáveis que descrevem o mesmo estado. O estado e as variáveis dinâmicas são igualmente importantes em teorias físicas. Um sistema pode assumir diferentes estados em tempos diferentes. Todos os estados possíveis do sistema estão englobados em seu espaço de fase. Por exemplo, o espaço de fase de uma partícula clássica (sistema simples) é uma multiplicidade diferenciável de seis dimensões. Quando as variáveis dinâmicas específicas são escolhidas, o estado da partícula pode ser definitivamente descrito, digamos, em termos de sua posição e momentum. A partícula é governada pela equação de movimento de Newton, e a variação temporal de seu estado traça uma curva no espaço de fase.

A estrutura da mecânica quântica tem mais elementos. Mais especificamente, suas variáveis dinâmicas (como já vimos, chamadas *observáveis*), têm uma estrutura conceitual mais complicada. Além de descrever o estado, uma propriedade que ele divide com as variáveis dinâmicas clássicas, um observável também nos dá os possíveis resultados de uma medida. Mecânica quântica prevê a probabilidade de obter cada resultado. Nessa seção, consideraremos apenas estados puros de sistemas físicos simples (individual) e observáveis com espectros não degenerados.

Com os conceitos primitivos expostos acima, consideremos agora os postulados da mecânica quântica. Vou escrevê-los novamente, agora de uma maneira completa, introduzindo o que estava faltando e, portanto, mudando a ordem estabelecida nas seções anteriores. Abaixo de cada postulado faremos comentários.

Postulado 1. *Um estado de um sistema quântico é representado por um vetor (raio) unitário $|\alpha\rangle$ em um espaço de Hilbert complexo \mathbb{H} .*

O assunto da mecânica quântica é um sistema isolado, cujas interações com o resto do mundo, incluindo instrumentos para a sua medida, são negligenciadas. Com muita frequência, sistemas simples (individuais) são considerados. Tais sistemas não são meramente ideais; recentes experimentos têm produzido estados de um único fóton e “capturado” átomos individuais para registrar suas transições. Algumas vezes, um sistema pode também estar em um ensemble de itens tratados como uma unidade, tal como uma coleção de elétrons preparados em algum modo definido (por exemplo, em um estado de spin up).

Sistemas quânticos são geralmente microscópicos, mas apenas a dimensão não é um critério suficiente. Por exemplo, o fenômeno da supercondutividade pode ser bem extenso, e a barra de Weber elaborada para experimentos com objetivo de detectar ondas gravitacionais pesa quase uma tonelada e mesmo assim ambos os sistemas podem ser representados por um vetor estado quântico (Ket). Em cosmologia quântica, todo o universo é representado por um estado quântico. Podemos então considerar o mundo quântico em regiões onde a Física clássica falha. Tal qualificação impõe um limite sobre a validade da mecânica quântica; não existe ainda evidência de que ela se aplique diretamente a entidades clássicas. O limite é “embaçado”; não temos critérios satisfatórios que separam sistemas quânticos de clássicos.

Um estado quântico é o resumo máximo e completo das características do sistema quântico em um momento do tempo. Para efeito de comparação, a qualificação acima tem o mesmo significado que a frase “em mecânica Newtoniana, a equação de movimento com condições iniciais nos dá uma descrição completa e máxima da trajetória de uma partícula clássica”. A descrição do estado consiste de constantes características tais como a massa e a carga do sistema, e as variáveis características que mudam no tempo. A coleção de todos os estados permissíveis para um sistema quântico é representado teoricamente por seu “espaço-estado” (ou espaço de fase), o que é um espaço de Hilbert complexo. Um espaço de Hilbert \mathbb{H} é uma

generalização do espaço Euclidiano familiar. Ele é um espaço linear cujos elementos $|\beta\rangle$ são chamados vetores (ou raios). Ele é também equipado com um produto interno, que mapeia um par de vetores $|\beta_i\rangle$ e $|\beta_j\rangle$ em um número complexo $\langle\beta_i|\beta_j\rangle$. Dois vetores $|\beta_i\rangle$ e $|\beta_j\rangle$ são ortonormais se $\langle\beta_i|\beta_j\rangle = \delta_{ij}$ e um conjunto ortonormal de vetores $\{|\beta_i\rangle\}$ formam uma base de \mathbb{H} se cada vetor em \mathbb{H} pode ser escrito como uma combinação linear de seus membros. Uma base de \mathbb{H} é análoga a um sistema de coordenadas na geometria cartesiana. O número de vetores da base nos dá a dimensão de \mathbb{H} .

Como já vimos, um estado quântico é representado por um vetor unitário $|\alpha\rangle$, mas lembrando que um vetor unitário é aquele cuja a norma ou magnitude é igual a 1, $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$, segue que se $|\alpha\rangle$ representa um estado, então $e^{i\theta}|\alpha\rangle$, onde θ é um número arbitrário chamado fator de fase, também representa o mesmo estado. As características de um estado são mais óbvias a partir de suas relações com outros estados. Um vetor pode ser representado como uma combinação linear de outros vetores; similarmente, um estado pode ser expandido em uma superposição linear de outros estados. Este é o princípio de superposição quântico. O princípio pode ser entendido da seguinte maneira: a adição ou subtração de quantidades geralmente levam a uma quantidade do mesmo tipo; a soma de dois comprimentos é um comprimento, a superposição de dois estados quânticos é um estado quântico. Mecânica quântica é peculiar no sentido que seu próprio espaço de fase possui a estrutura requerida para suportar as operações de adição e subtração.

Mais especificamente, $|\alpha\rangle$ pode ser escrito em termos de um conjunto de estados da base $\{|\phi_i\rangle\}$ como $|\alpha\rangle = \sum_i \langle\phi_i|\alpha\rangle |\phi_i\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle$; $\sum_i |c_i|^2 = 1$, onde a soma $|c_i|^2$ é unitária quando $|\alpha\rangle$ é um vetor unitário. Os números complexos $c_i \equiv \langle\phi_i|\alpha\rangle$ são chamados amplitudes, ou amplitudes de probabilidades para distinguirmos de outras amplitudes familiares na mecânica clássica. Não podemos fazer confusões: o quadrado absoluto $|c_i|^2$ é uma probabilidade; c_i não. A raiz quadrada de uma quantidade não é, em geral, uma quantidade do mesmo tipo; a raiz quadrada de uma área é um comprimento, mas a raiz quadrada de um comprimento eu não sei o que é. Assim, o significado de c_i não precisa ser conferido.

Postulado 2. Um observável associado com um sistema quântico é representado por um único operador hermitiano A atuando sobre seu espaço de Hilbert.

Um observável é uma variável dinâmica. Exemplos familiares de observáveis são energia, posição e momentum. Eles não devem ser confundidos com seus xarás clássicos. O momentum quântico tem uma

estrutura mais rica que o momentum clássico. Alguns observáveis, como o spin, não tem nem análogo clássico.

Um operador A é uma transformação linear do espaço de Hilbert \mathbb{H} nele próprio. Muitos operadores são empregados em teorias quânticas, mas apenas os operadores hermitianos representam observáveis. Os operadores hermitianos se distinguem por possuírem um espectro consistindo somente de números reais. Para um observável A , o espectro $\Lambda(A)$ do operador que o representa compreende o conjunto de todos os possíveis valores obtidos em uma medida de A . Suponha que o observável A tenha um espectro puro, sendo que $\Lambda(A) = \{a_i\}$, onde os números reais a_i são chamados auto valores de A . Os auto valores podem ser resultados diretos de experimentos. A estipulação explícita de algumas quantidades que podem ser medidas justificam o nome *observável*, embora os auto valores ou valores espectrais são somente parte da estrutura dos observáveis.

Como uma transformação, um operador geralmente muda (mapeia) um estado em outro. Entretanto, existem estados $|a_i\rangle$ tais que, para um observável A , temos $A|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$. Os estados $|a_i\rangle$ são denominados autoestados de A . Eles são invariantes sob a operação de A , visto que, tudo o que A faz é multiplicar o estado $|a_i\rangle$ por um fator numérico a_i . O conjunto de estados $\{|a_i\rangle\}$ constitui uma base de \mathbb{H} : em termos da base, podemos expressar qualquer estado ket $|\phi\rangle$. Para observáveis com espectro não degenerado, cada autovalor é associado com um autoestado. Já vimos que é muito direto derivar o *valor esperado* de um observável A no estado $|\phi\rangle$, $\langle A \rangle_\phi = \langle \phi | A | \phi \rangle$.

Um estado $|\phi\rangle$ não está “amarrado” a um observável ou uma base particular. Suponha que B seja outro observável com um conjunto de autoestados $\{|b_i\rangle\}$. Já sabemos que sempre podemos encontrar um operador unitário U que faz uma mudança de base de $|a_i\rangle$ para $|b_i\rangle$. As diferentes bases associadas com os diferentes observáveis formam representações do estado, por exemplo, a representação das posições ou a dos momenta. A amplitude na representação das posições é chamada *função de onda*.

Dois operadores A e B comutam se $AB = BA$. Operadores, em geral, não comutam. A ordem das operações são importantes porque o estado final de uma operação é o estado inicial da próxima. Para um conjunto de operadores que comutam mutualmente A, B, C, \dots , podemos encontrar uma representação cuja a base é formada por autovetores simultâneos de A, B, C, \dots . Dois observáveis são compatíveis se os operadores que os representam comutam, e incompatíveis se eles não comutam. Observáveis incompatíveis não admitem autoestados simultâneos e são peculiares em mecânica quântica. Exemplo famoso de observáveis incompatíveis são o momentum P_x e o observável posição X . Sua relação de comutação $[X, P_x] = i\hbar$, foi denominada condição quântica fundamental por Dirac. Procurem rever um pouco mais as seções anteriores para fixar as idéias aqui resumidas.

Postulado 3. A evolução temporal do estado (ket) é governada pela equação de Schrödinger $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$, onde $i = \sqrt{-1}$, \hbar é a constante de Planck dividida por 2π , e H é o operador Hamiltoniano representando a energia total do sistema.

A equação de Schrödinger é uma equação diferencial do tipo das equações de movimento clássicas. Se o estado (ket) do sistema é dado em um instante de tempo inicial $t = t_0$, então ele é determinado para todo $t > t_0$. Assim, o estado quântico evolui deterministicamente no sentido que o movimento de uma partícula clássica é determinístico. De fato, os estados quânticos são ainda bem mais comportados. Mecânica quântica não admite movimentos caóticos como em mecânica clássica, por que a equação de Schrödinger é linear e suas soluções são periódicas ou quase periódicas.

Postulado 4. O único resultado possível de uma medida de um observável físico representado por um operador A é um dos autovalores desse operador.

Postulado 5. Quando um observável físico é medido em um sistema descrito pelo KET normalizado $|\alpha\rangle$, a probabilidade de encontrarmos um autovalor a' do correspondente operador A é $|\langle a' | \alpha \rangle|^2$, onde $|a'\rangle$ é um autoket normalizado de A associado ao autovalor a' .

Este é o postulado de Born da mecânica quântica. Ele não diz absolutamente nada sobre a probabilidade que o estado tem ou sobre a probabilidade de que o observável possui um certo autovalor; a probabilidade e o autovalor pertencem aos dados observados ou resultados de experimentos. O conceito de probabilidade é apropriado, pois estamos falando sobre o resultado observado de um estado puro simples, o qual pode ser apenas um “click” de um contador Geiger.

Um evento único nos diz muito pouco sobre o sistema quântico em estudo. Assim, o postulado de Born é sempre complementado com explicações que o converte em asserções estatísticas. Diz-se que experimentos envolvem observações repetidas ou observações sobre um ensemble de sistemas simples. Desta forma, o postulado 5 é convertido para a seguinte forma:

Postulado 5'. Em um número muito grande de medidas de um observável A , cada medida sendo feita em um ensemble de N sistemas todos no mesmo estado $|\alpha\rangle$, então, se N é grande, nos resultados de quase todas as medidas, uma fração $|\langle a' | \alpha \rangle|^2$ dos dados tem o valor a' .

Este é um enunciado fenomenológico que pode ser verificado empiricamente. Ele não nos diz nada sobre o resultado de um sistema simples. O resultado de cada medida sobre um ensemble constitui uma amostra, o qual

é uma distribuição de N dados entre os valores a' . Ele não descreve nem o resultado de um sistema simples nem o resultado de uma amostra simples, mas sim, a estatística de um grande número de amostras. Na prática, fazemos apenas poucas medidas ou, como os estatísticos dizem, tomamos algumas poucas amostras. Em cada amostra, a fração de dados com um determinado a' pode desviar de $|\langle a' | \alpha \rangle|^2$. Entretanto, este postulado nos assegura que se a quantidade de amostras ou a dimensão do ensemble for suficientemente grande, então, mesmo que se fizermos somente uma medida sobre um ensemble, a probabilidade é quase 1 de que teremos uma distribuição onde uma fração $|\langle a' | \alpha \rangle|^2$ dos dados tenha o valor a' .

O termo *valor esperado* $\langle A \rangle_\alpha$ é melhor entendido no contexto de um sistema simples, onde isto ocorre com probabilidade. Quando convertemos a situação para o enunciado estatístico, $\langle A \rangle_\alpha$ é mais apropriadamente interpretado como o *valor médio* da distribuição de dados.

Comentários

A estrutura da mecânica quântica apresentada acima mostra uma peculiaridade: Os conceitos nos postulados 1 a 4 são completamente diferentes dos conceitos contidos no postulado 5, e pouca explicação é dada para a mistura dos mesmos. Mecânica quântica nos dá duas descrições que diferem em natureza, assunto e tratamento. As características descritas pelo vetores estado (kets) são *não-clássicas*; elas são extremamente complexas e estranhamente emaranhadas quando expressa em termos clássicos. Além da sua "*não-classicalidade*", a descrição do ket é apropriada; ela é essencialmente a descrição de um sistema simples evoluindo de acordo com uma equação de movimento. A descrição oferecida pela estatística dos autovalores é exatamente o oposto. As características que ela descreve são clássicas e familiares. Mas apesar de sua "*classicalidade*", ela tem a aparência de um bastardo; ela se aplica não a um sistema simples, mas somente a ensembles, e é abruptamente "atirada" sem qualquer palavra sobre suas leis de movimento; ela é meramente o resultado do "colapso" das características não clássicas. O ponto crucial é que mecânica quântica não fornece nenhuma correlação substancial entre as duas descrições. A única relação entre elas é formal e abstrata. Tal relação é fornecida pelo observável, cujos auto-estados contribuem para a descrição do estado e cujos autovalores para a descrição estatística.

Bibliografia

1. J.J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Addison-Wesley Publishing Company, New York, 1994.
2. S.Y. Auyang, How is Quantum Field Theory Possible? , Oxford University Press, New York, 1995.