

O experimento de Stern-Gerlach (1922)

Ilustra o comportamento quântico de mat. simples (spin $\frac{1}{2}$). "Laboratório" conceitual para o entendimento da teoria.

- É uma medida
- ~~Relaciona~~ as propriedades magnéticas de átomos de prata.

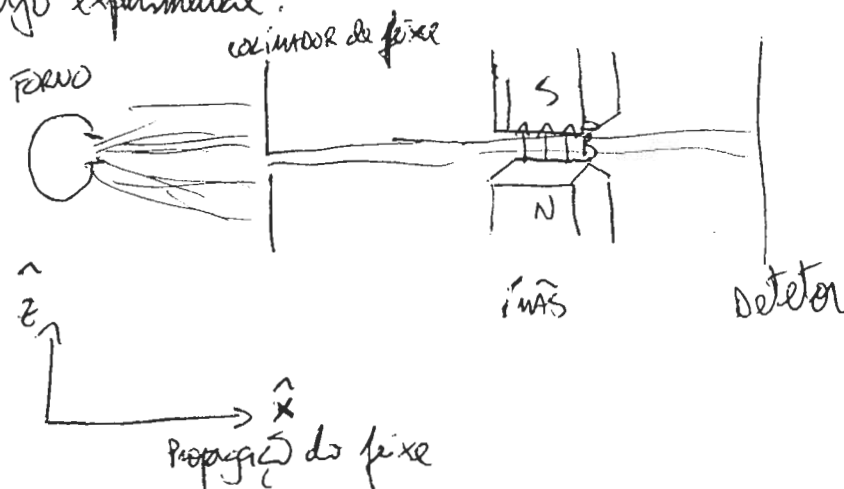
~~Átomos de prata~~ ^{Ag} Átomos de prata: 46 elétrons em nuvem ~~esférica~~ ^{esférica}
+ 1 elétron na camada $5s$.

$\Rightarrow$ momento ^{angular} ~~magnético~~ do átomo = mon. ^{angular} ~~magnético~~ do ~~ele~~ elétron externo. (SPIN)

$\Rightarrow$ mon. magnético $\vec{\mu} \propto \vec{S}$ $\leftarrow$ SPIN.

$$(\vec{\mu} = \frac{e}{m_e c} \vec{S})$$

- Arranjo experimental:



- campo $\vec{B}$ entre ímãs é inhomôneo na direção z .

- Efeito de $\vec{B}$ sobre átomos:

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \Rightarrow F_z = \frac{\partial}{\partial z} (\vec{\mu} \cdot \vec{B}) \approx \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

• análogo de ímãs para $\frac{\partial B_z}{\partial z} \gg \frac{\partial B_x}{\partial z}, \frac{\partial B_y}{\partial z}$

• Resultados: átomos com $\mu_z > 0$ ($S_z < 0$) sofre força $\uparrow$

$\mu_z < 0$

$\downarrow$

$\Rightarrow$ feixe se dividirá de acordo com μ_z .

- Classicamente, esperamos que μ_z do conjunto de átomos ~~seja~~ a distribua aleatoriamente entre $|\vec{\mu}|$ e $-|\vec{\mu}|$ — ~~o~~ [componente z de vetor aleatório]

Expectativa:



átomos

Resultados experimentais: $\nearrow$

- μ_z só tem 2 valores possíveis $\Rightarrow S_z$ também. (S_z^+ e S_z^-)

- O experimento permite estimar $S_z^{\pm}$.

$$S_z^{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} \quad \text{com } \hbar = \text{constante}$$

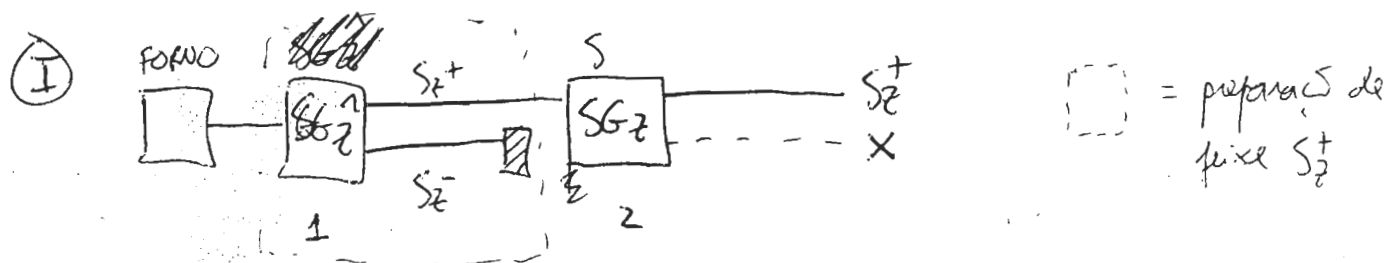
• Desobtem-se a quantização do momento angular $\vec{S}$ do elétron/átomo.

• A mesma quantização se obtém com ~~de~~ qualquer componente de $\vec{S}$.

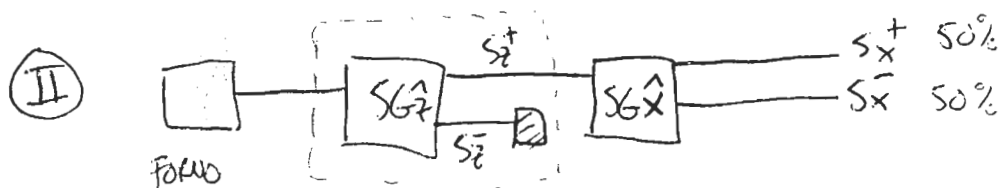
$$6,5822 \cdot 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s}$$

SG's ~~em~~ em sequência

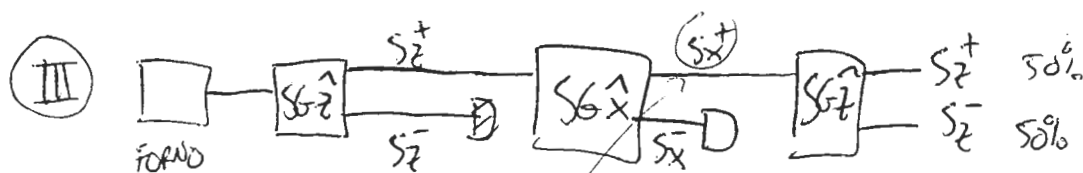
- Mais de um conjunto de ímãs SG com ~~orientações~~ orientações diferentes.
- Vamos analisar alguns experimentos de SG.



- SG₁ seleciona S_z^+ , e SG₂ "confirma" a seleção.



Interpretamos? Feixe S_z^+ 50% dos átomos ~~tem~~ tem S_z^+ e S_x^+ .
50% ~~tem~~ S_z^+ e S_x^- .



- Como ~~se~~ o feixe S_x^+ "readquire" um componente S_z^+ ?
- Na MQ as medidas não "filtram" propriedades. Cada medida recria estados ~~com~~ com novas propriedades.
 - A 2ª medida SG₂ "apaga" propriedades anteriores (S_z^+).
- Os resultados acima não dependem dos detalhes experimentais, são inevitáveis de acordo com a MQ.

SG nos mostra que:

- 1- Previsões da MQ são probabilísticas.
- 2- ~~Existem~~ Há pares de propriedades (S_x e S_z) que não podem ser determinados simultaneamente.
- 3- Medidas de propriedades alteram o sistema.
- 4- Como modelar uma medida em MQ:

- acoplar o int. a um ~~grau~~ grau de liberdade que possa ser medido
(~~ex~~ spin do e)

via interação adequada (momento/posição)
(Hamiltoniana) $H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$

6011.2.2

Vetores-estado e operadores

Em mec. clássica, o estado de 1 ^{interna} ~~partícula~~ = informação completa sobre as propriedades dell. ^{por exemplo,} Em mec. clássica, o estado de 1 partícula é dado pela sua posição e velocidade.

Em MQ:

espaço vetorial complexo

POSTULADO 1: O estado de um int. físico S é dado por um vetor $|\psi\rangle$ no espaço de Hilbert H apropriado ao sistema. [Qualquer combinação ^{linear} de vetores-estado representa um estado possível de S] = princípio da superposição.

Vamos formular a matemática básica de espaços vetoriais complexos, usando a notação de Dirac, que ~~simplifica os cálculos e o entendimento~~ é muito prática para a MQ.

Espaços vetoriais

- conj. de elementos (vetores) fechado por adição e multiplicação por escalares
em MQ = n. complexos

⇒ Se $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$ sã vetores ⇒ $a|\phi\rangle + b|\psi\rangle$

[↑ notas de dim] também é.

- Em MQ usamos muito 2 classes de espaços vetoriais:

(i) vetores discretos, representáveis por colunas de n. complexos:

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

(ii) ^{cont} conjunto de funções ~~contínuas~~, por exemplo o espaço de fcs diferenciáveis.

- conj. de vetores $\{|\phi_n\rangle\}$ é linearmente independente se $\sum_n c_n \phi_n = 0$ vale somente quando $c_n = 0 \forall n$. Se o conj. for linearmente dependente, é possível achar um dos ϕ_j como combinação linear dos outros.

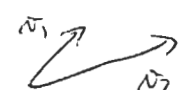
- O maior no. de vetores LI num espaço é a dimensão do espaço.

- Um conj. cl o no. máximo de vetores LI é chamado de

base do espaço.

- Qq. vetor pode ser exposto como comb.

linear de vetores-base.

Exemplos: ~~contínuas~~ (i)  v_1, v_2 são LI; formam base pl plano. dim = 2.

(ii) $\left\{ \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right\} n=1, \dots, \infty$ forma base pl esp. de funções de quadrado integrável entre 0 e L. dim = ∞

(iii) $\{\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)\}$ = harmônicos esféricos - base pl funções 3D de Q integrável. (d = ∞)

(iv) $\{1, x, x^2\}$ base pl polinômios de 2º grau - d = 3.

AXIOMAS PL ESPAÇO VETORIAL

- { conj. de elementos (vetores) $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle$ ~~em 2 operações~~
 { ~~definir~~ "corpo" de escalares (no. complexos, reais, extensões, etc)

com 2 operações: adição de vetores (ex: $|\alpha\rangle + |\beta\rangle$)
multiplicação de escalar por vetor (ex: $b \cdot |\alpha\rangle$)

Satisfazendo:

$\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle$

- 1) Associatividade da adição $(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) + |\gamma\rangle = |\alpha\rangle + (|\beta\rangle + |\gamma\rangle)$
- 2) Comutatividade da adição: $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle \quad \forall |\beta\rangle, |\alpha\rangle$
- 3) $\exists$ ~~o~~ vetor $|0\rangle$ tal que $|\alpha\rangle + |0\rangle = |\alpha\rangle \quad \forall |\alpha\rangle$
- 4) Adição tem inverso: $\forall |\alpha\rangle \exists \underset{\substack{\uparrow \\ \text{inverso de } |\alpha\rangle}}{|\neg\alpha\rangle}$ tal que $|\alpha\rangle + |\neg\alpha\rangle = |0\rangle$
- 5) ~~Multiplicação~~ Multiplicação de escalar por vetor é distributiva em relação à adição de vetores,
 $a(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = a|\alpha\rangle + a|\beta\rangle$
- e distributiva em relação à adição de escalares
 ~~$(a+b)|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle + b|\alpha\rangle$~~
- 6) Mult. de escalar por vetor
 é associativa com relação à mult. de escalares: $a(b|\alpha\rangle) = (ab)|\alpha\rangle$
- 7) $0|\alpha\rangle = |0\rangle \quad (\forall |\alpha\rangle)$
 $1|\alpha\rangle = |\alpha\rangle \quad (\forall |\alpha\rangle)$

Produto interno (ou escalar)

• Associa escalar $\langle \psi | \phi \rangle$ a cada par de vetores. Satisfaz as propriedades:

(a) $\langle \psi | \phi \rangle = \text{complexo};$

(b) $\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^*$

(c) $\langle \phi | c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \rangle = c_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + c_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle \Rightarrow \text{prod. interno é linear no 2º argumento}$

(d) $\langle \phi | \phi \rangle \geq 0$, com igualdade se $|\phi\rangle = 0$ (vetor nulo)

De b) e c): $\langle c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 | \phi \rangle = c_1^* \langle \psi_1 | \phi \rangle + c_2^* \langle \psi_2 | \phi \rangle$
 $\Rightarrow$ produto interno é anti-linear no 1º argumento.

• O produto interno generaliza a ideia de comprimento ($\sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$) e ângulo entre 2 vetores.
 n° espaço vetoriais gerais.

→ Para vetores-coluna: $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_d \end{pmatrix}$ $|\phi\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_d \end{pmatrix}$

$\Rightarrow \langle \psi | \phi \rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \dots$
 $= \sum_{i=1}^d a_i^* b_i$

- Para função de x : $\langle \psi | \phi \rangle = \int \psi^*(x) \phi(x) dx$

• Norma (ou comprimento) de vetor: $\| |\phi\rangle \| = \langle \phi | \phi \rangle^{\frac{1}{2}}$

• De b) $\langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle^* \Rightarrow \langle \psi | \psi \rangle$ é real (como assumimos em d))

• 2 kets $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ são ortogonais se $\langle \alpha | \beta \rangle = 0$ (e então $\langle \beta | \alpha \rangle = 0$ também).

• Qualquer ket não-nulo pode ser normalizado: $|\tilde{\alpha}\rangle = \frac{1}{\| |\alpha\rangle \|} |\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}} |\alpha\rangle$

Vetores x raios

- Começo no postulado 1:

Postulado 1': Estado de S é um raio no espaço de Hilbert associado.

~~raio = conj. de todos os múltiplos de $|\psi\rangle$~~

raio = $\{ |\alpha\rangle \}$ e todos os vetores $c|\alpha\rangle$ com $c \neq 0$

- Por isso, frequentemente representamos o est. físico de S pelo vetor normalizado:

$$|\alpha'\rangle = \frac{1}{\| |\alpha\rangle \|} |\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}} |\alpha\rangle$$

- Outra consequência: ~~se multiplicar $|\psi\rangle$ por fase global~~ multiplicar $|\psi\rangle$ por fase global $e^{i\theta}$ não altera o estado físico. ~~o~~
- (raio)

- muitas vezes usamos a terminologia vetor de estado ~~sempre~~ quando, a rigor, não raio.

2 Teoremas

- Desigualdade de Schwarz: $|\langle \psi | \phi \rangle|^2 \leq \langle \psi | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle$
- Desigualdade triangular: $\| |\psi\rangle + |\phi\rangle \| \leq \| |\psi\rangle \| + \| |\phi\rangle \|$
- Nos 2 casos, vale a igualdade se $|\psi\rangle = c|\phi\rangle$.

Espaço vetorial dual aos kets $\Rightarrow$ os bras

- Qd. espaço ~~bras~~ ^{vetorial} V tem um outro espaço vetorial associado - o espaço ^{V'} dos funcionais lineares em V . Explicando:
 - Um funcional linear F associa um escalar ($F(\phi)$) a cada vetor $|\phi\rangle$, tal que $F(a|\phi\rangle + b|\psi\rangle) = aF(|\phi\rangle) + bF(|\psi\rangle)$ p/ quaisquer $|\phi\rangle, |\psi\rangle, a, b$.
 - O conjunto de funcionais lineares $\{F\}$ formam um espaço vetorial V' se definirmos a soma de funcionais:

$$(F_1 + F_2)|\phi\rangle = F_1|\phi\rangle + F_2|\phi\rangle$$
- O espaço vetorial ^{V'} dos funcionais lineares atuando em kets ~~é~~ ^{$|\phi\rangle$} chamado de espaço dos bras $\langle F|$.
- ⑧ $\leftarrow$ - O bra $\langle F|$ é o funcional linear que associa a cada ket $|\phi\rangle$ o número complexo $\langle F|\phi\rangle \in$ produto interno de $|F\rangle$ e $|\phi\rangle$.
- ⑧ $\leftarrow$ [Teorema de Riesz, Bili. 1.1] É possível mostrar que ~~existe~~ existe correspondência biunívoca entre funcionais F e kets $|F\rangle$. A associação é anti-linear:

$$c_1^* \langle F| + c_2^* \langle G| \leftrightarrow c_1 |F\rangle + c_2 |G\rangle$$

bras
kets

Operadores

- Pelo postulado 1, estados físicos são representados por vetores (ou raios).
- Para representar observáveis = grandezas físicas que podemos medir ("observar")

vamos precisar de operadores que atuam ^{nos} Kets.

> DINÂMICA: Idem.

- Um operador X atua num Ket ^(representa), resultando em outro Ket ^(pelo seguinte):

$$X(|\alpha\rangle) = X|\alpha\rangle$$

- X e Y são iguais se $X|\alpha\rangle = Y|\alpha\rangle \quad \forall |\alpha\rangle$.

- X é o operador nulo se $X|\alpha\rangle = 0 \quad \forall |\alpha\rangle$.

- Adição de operadores: ~~os operadores~~ tem as propriedades

$$(i) X + Y = Y + X \quad (\text{comutativa})$$

$$(ii) X + (Y + Z) = (X + Y) + Z \quad (\text{associativa})$$

- Praticamente todos os operadores que usaremos são lineares:

$$X(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1 X|\psi_1\rangle + c_2 X|\psi_2\rangle$$

- Multiplicação de operadores: $AB\psi := A(B\psi)$ (definição).

$$\text{Logo, } A(BC) = (AB)C \quad (\text{associativa})$$

NÃO $AB \neq BA$ em geral.

Exemplo:

1) - Op. linear em ~~espaço~~ H discreto e finito e representado por matriz quadrada.

$$M|\psi\rangle = |\phi\rangle.$$

• Escolha base ~~ortonormal~~ p/ espaço : $\{|u_i\rangle, i=1, \dots, d\}$, $\langle u_i | u_k \rangle = \delta_{i,k}$. $\overset{\dim(H)}{d}$

$$\Rightarrow |\psi\rangle = \sum_j a_j |u_j\rangle, \quad |\phi\rangle = \sum_k b_k |u_k\rangle$$

$$\Rightarrow M \sum_j a_j |u_j\rangle = \sum_k b_k |u_k\rangle \quad [\cdot \langle u_i |]$$

$$\Rightarrow \sum_j \underbrace{\langle u_i | M | u_j \rangle}_{\delta_{i,j}} a_j = \sum_k \underbrace{\langle u_i | u_k \rangle}_{\delta_{i,k}} b_k = b_i$$

$$\Rightarrow \sum_j M_{ij} a_j = b_i \quad \text{onde } M_{ij} \equiv \langle u_i | M | u_j \rangle \text{ é o elemento de matriz de } M.$$

• Ex. de multiplicação matricial:

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & \dots \\ \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_d \end{pmatrix}$$

$$M |\psi\rangle = |\phi\rangle$$

2) H : espaço de função da variável x .

Operador: $\frac{d}{dx} \times$ significa: • multiplique função f por x .
• derive o result. em relação a x

$$\Rightarrow \frac{d}{dx} (x f) = x \frac{df}{dx} + f = \left(x \frac{d}{dx} + 1 \right) f$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dx} \times = x \frac{d}{dx} + 1 \quad \leftarrow \text{operadores não comutativos}$$

diferenciais não iguais

- vemos que $\frac{d}{dx} \times \neq x \frac{d}{dx}$ $\leftarrow$ ~~os operadores~~ x e $\frac{d}{dx}$ não comutam.

Produto externo:

11

- Já "misturamos" operadores e vetores-estado de várias formas:

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \text{escalar}$$

$$X | \alpha \rangle = \text{ket}$$

$$\langle \alpha | X = \text{BRA}$$

$$XY = \text{operador}$$

Postulado: associatividade da notação de Dirac - as 2 interpretações sã válidas

Produto externo ket-BRA: $|\beta\rangle\langle\alpha|$

$|\beta\rangle\langle\alpha|$ é um operador, definido assim:

$$\underbrace{(|\beta\rangle\langle\alpha|)}_{\text{op.}} \underbrace{|\alpha\rangle}_{\text{ket}} = \underbrace{|\beta\rangle}_{\text{ket}} \underbrace{(\langle\alpha|\alpha\rangle)}_{\text{escalar}}$$

← ~~isso define a ação do operador $|\beta\rangle\langle\alpha|$ sobre qualquer $|\alpha\rangle$.~~

- Qual é o conjugado Hermitiano de $|\beta\rangle\langle\alpha|$?

Lembre que $\langle \phi | A^\dagger | \psi \rangle^* = \langle \psi | A | \phi \rangle$

$$\Rightarrow \langle \phi | (|\beta\rangle\langle\alpha|)^\dagger | \psi \rangle^* = \langle \psi | \beta\rangle\langle\alpha | \phi \rangle \quad (*)$$

$$\langle \phi | (|\beta\rangle\langle\alpha|)^\dagger | \psi \rangle = \underbrace{\langle \beta | \psi \rangle}_{\text{esc.}} \underbrace{\langle \phi | \alpha \rangle}_{\text{esc.}} = \langle \phi | \alpha \rangle \langle \beta | \psi \rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{|\beta\rangle\langle\alpha|^\dagger = |\alpha\rangle\langle\beta|} = \langle \phi | (|\alpha\rangle\langle\beta|) | \psi \rangle$$

Operadores Hermitianos

- A é Hermitiano se $A^\dagger = A$. Como $\langle \phi | A^\dagger | \psi \rangle^* = \langle \psi | A | \phi \rangle$, se $A = A^\dagger \Rightarrow \boxed{\langle \phi | A | \psi \rangle^* = \langle \psi | A | \phi \rangle}$

• Determinando se A é Hermitiano.

Teorema: Se $\langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle^* \quad \forall |\psi\rangle$
 $\Rightarrow A = A^\dagger$.

- Lembrando: Se $A|\phi\rangle = a|\phi\rangle \Rightarrow |\phi\rangle$ é autovetor de A , com autovalor a .

- a eq. de autovalor no espaço dos bras fica: $\langle \phi | A^\dagger = a^* \langle \phi |$

Teorema: Se A é op. Hermitiano, todos seus autovalores são reais.

$$A|\phi\rangle = a|\phi\rangle \quad \text{Como } A \text{ é Hermitiano, } \langle \phi | A | \phi \rangle = \langle \phi | A | \phi \rangle^*$$

$$\Rightarrow \langle \phi | a | \phi \rangle = \langle \phi | a | \phi \rangle^* \Leftrightarrow a \langle \phi | \phi \rangle = a^* \langle \phi | \phi \rangle$$

$$\Rightarrow a = a^* \Leftrightarrow a \text{ real.}$$

Teorema: Autovetores de op. Hermitiano correspondentes a autovalores diferentes de op. Hermitiano são ortogonais.

$$\begin{cases} A|\phi_1\rangle = a_1|\phi_1\rangle \\ A|\phi_2\rangle = a_2|\phi_2\rangle \end{cases}$$

Se que $\langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle = \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle^*$

$$\langle \phi_1 | a_2 | \phi_2 \rangle = \langle \phi_2 | a_1 | \phi_1 \rangle^*$$

$$= a_2 \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = a_1^* \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle$$

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow 0 &= \langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle - \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle^* \\
 &= a_2 \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle - a_1 \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle^* \\
 &= a_2 \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle - a_1 \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle \\
 &= (a_2 - a_1) \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle
 \end{aligned}$$

$\downarrow (A|\phi_1\rangle)^* = (a|\phi_1\rangle)^* = a^*|\phi_1\rangle$
 (a real)

$\Rightarrow$ Se $a_2 \neq a_1 \Rightarrow \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = 0 \Leftrightarrow$ ortogonais.

— II —

Como os autovetores são ortogonais (e cada autovetor é definido a menos de constante multiplicativa), $\left[\begin{array}{l} \rightarrow |\phi_i\rangle \text{ é autovetor com autovalor } a_i \\ \Rightarrow c|\phi_i\rangle \text{ também é} \end{array} \right]$ podemos escolher um conjunto ortonormal de autovetores:

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}$$

• Para $\mathcal{H}$ de dimensão finita, o conj. $\{|\phi_i\rangle\}$ é completo, i.e., forma uma base para $\mathcal{H}$.

$\Leftrightarrow$ qualquer vetor $|\psi\rangle$ pode ser expandido em termos dos $\{|\phi_i\rangle\}$:

$$|\psi\rangle = \sum c_i |\phi_i\rangle$$

[para discussão e referência da prova, veja Ball. Sec 1.3]

• O mesmo não é necessariamente verdade em espaço de Hilbert de dimensão infinita — ver contra-exemplos em).

Autovalores de op. Hermitianos como base

$$|\alpha\rangle = \sum_j c_j |\phi_j\rangle$$

$\{|\phi_j\rangle\}$ = base de autoval. de op. Hermitiano A.

[• $\langle\phi_i|$ dos 2 lados da eq.]

$$\langle\phi_i|\alpha\rangle = \sum_j c_j \underbrace{\langle\phi_i|\phi_j\rangle}_{\delta_{ij}} = c_i \quad \leftarrow \text{coefs. da expans\~ao}$$

os produtos internos $\langle\phi_i|\alpha\rangle$.

$$\Rightarrow |\alpha\rangle = \sum_j \underbrace{(\langle\phi_j|\alpha\rangle)}_{\text{auto. c.}} |\phi_j\rangle$$

$$= \sum_j |\phi_j\rangle \langle\phi_j|\alpha\rangle$$

• A expans\~ao de $|\alpha\rangle$ na base $\{|\phi_i\rangle\}$ \~e an\~aloga \~a expans\~ao de vetor $\vec{v}$ em base pl esp. vetorial real:

$$\vec{v} = v_1 \hat{v}_1 + v_2 \hat{v}_2 + v_3 \hat{v}_3 = \sum_j \hat{v}_j (\underbrace{\hat{v}_j \cdot \vec{v}}_{\text{componente } v_j})$$

$\uparrow$ vetor unit\~ario

De modo:

$$|\alpha\rangle = \sum_j |\phi_j\rangle \langle\phi_j|\alpha\rangle$$

Usa a
Regra associativa, v\~elida pl
notaç\~ao de Dirac:

$$|\alpha\rangle = \sum_j \underbrace{|\phi_j\rangle}_{\text{vetor}} \underbrace{\langle\phi_j|\alpha\rangle}_{\text{n\~o complexo}}$$

ou } ambas as interpretaç\~oes s\~o
v\~alidas.

$$|\alpha\rangle = \sum_j \underbrace{|\phi_j\rangle}_{\text{operador}} \underbrace{\langle\phi_j|\alpha\rangle}_{\text{vetor}}$$

Na 2ª expansão, $\sum_j |\phi_j \rangle \langle \phi_j|$ deve ser o op. identidade $\mathbb{1}$.

$$\left[\sum_j |\phi_j \rangle \langle \phi_j| = \mathbb{1} \right] \leftarrow \text{relação de fechamento ou completude do conj. } \{|\phi_j \rangle\}.$$

SAK1.3

A rel. de completude é muito útil. Por exemplo:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \alpha \rangle &= \langle \alpha | \mathbb{1} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \left(\sum_i |\phi_i \rangle \langle \phi_i| \right) | \alpha \rangle \\ &= \sum_i \langle \alpha | \phi_i \rangle \langle \phi_i | \alpha \rangle = \sum_i |\langle \phi_i | \alpha \rangle|^2 \end{aligned}$$

(mudança de notação) $\uparrow \mathbb{1}$

Lembrando que $\langle \phi_i | \alpha \rangle$ são os coeficientes da expansão de $|\alpha \rangle$ na base $\{|\phi_i \rangle\}$

$$|\alpha \rangle = \sum_i \underbrace{\langle \phi_i | \alpha \rangle}_{c_i} |\phi_i \rangle, \text{ vemos que } \sum_i |c_i|^2 = 1 \text{ (assumindo } |\alpha \rangle \text{ normalizado)}$$

Projetores

Vimos que $\mathbb{1} = \sum_j |\phi_j \rangle \langle \phi_j|$ é operador. Na verdade, cada termo dessa soma é um operador de projeção, ou projetor.

O porquê do nome:

$$(|\phi_j \rangle \langle \phi_j|) |\alpha \rangle = |\phi_j \rangle \underbrace{\langle \phi_j | \alpha \rangle}_{\text{num. complexo}} = \underbrace{\langle \phi_j | \alpha \rangle}_{\text{= componente de } |\alpha \rangle \text{ na direção } |\phi_j \rangle}} |\phi_j \rangle$$

Representação de op. por matriz quadrada

$$X = \mathbb{1} X \mathbb{1} = \sum_i \sum_j |\phi_i\rangle \langle \phi_i| X |\phi_j\rangle \langle \phi_j|$$

$\swarrow \quad \quad \quad \searrow$
 $\sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| X \sum_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j|$

Posi. Associativo

$$= \sum_i \sum_j |\phi_i\rangle \underbrace{\langle \phi_i| X |\phi_j\rangle}_{\text{num. c.}} \langle \phi_j|$$

$$= \sum_i \sum_j \langle \phi_i| X |\phi_j\rangle |\phi_i\rangle \langle \phi_j|$$

- Temos d^2 números complexos que definem o op. X expandido numa base p/ operadores — os operadores $\{|\phi_i\rangle \langle \phi_j|\}$.
- Organizamos os coeficientes (= "elementos de matriz") de X em matriz $d \times d$:

$$X = \begin{pmatrix} \langle \phi_1| X |\phi_1\rangle & \langle \phi_1| X |\phi_2\rangle & \dots \\ \langle \phi_2| X |\phi_1\rangle & \langle \phi_2| X |\phi_2\rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ \langle \phi_d| X |\phi_1\rangle & \langle \phi_d| X |\phi_2\rangle & \dots \end{pmatrix}$$

- Sabemos que $\langle \phi_i| X |\phi_j\rangle = \langle \phi_j| X^\dagger |\phi_i\rangle^*$, ou seja, em termos das matrizes a ~~matriz~~ matriz que representa $X^\dagger$ é a matriz X transposta e conjugada.

- Se o op. B é Hermitiano, $\langle \phi_i| B |\phi_j\rangle = \langle \phi_j| B |\phi_i\rangle^*$

- O operador produto $Z = XY$ é representado por matriz que é o produto das matrizes X e Y .

$$\langle \phi_i | Z | \phi_j \rangle = \langle \phi_i | X Y | \phi_j \rangle = \sum_K \underbrace{\langle \phi_i | X | \phi_K \rangle}_{X_{iK}} \underbrace{\langle \phi_K | Y | \phi_j \rangle}_{Y_{Kj}}$$

$$\Rightarrow Z_{ij} = \sum_K X_{iK} Y_{Kj}$$

- Repare que a representação de um op. A como matriz depende da base usada.

- Outras propriedades de representações de um op. A podem ser indep. da base. Exemplos. Traço do op. A :

$$\text{Tr } A = \sum_j \langle \phi_j | A | \phi_j \rangle = \text{soma dos elementos diagonais}$$

[Exercício extra: mostre que é indep. da base]

- Já vimos que $|\beta\rangle = X|\alpha\rangle$ também é eq. matricial

$$\langle \phi_i | \beta \rangle = \langle \phi_i | X | \alpha \rangle = \sum_{\phi_j} \underbrace{\langle \phi_i | X | \phi_j \rangle}_{X_{ij}} \langle \phi_j | \alpha \rangle$$

$$\beta_i = \sum_j X_{ij} \alpha_j$$

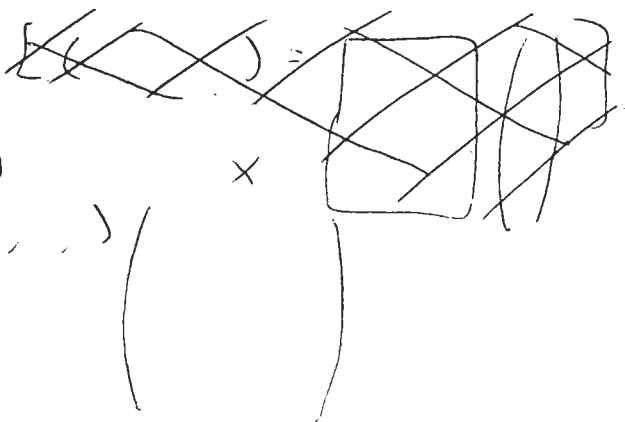
• e B&A's?

$$\langle \beta | = \langle \alpha | X \quad \cdot | \phi_i \rangle$$

$$\langle \beta | \phi_i \rangle = \underbrace{\langle \alpha |}_{\perp} X | \phi_i \rangle = \sum_j \langle \alpha | \phi_j \rangle X_{ji}$$

$$\Rightarrow \beta_i^* = \sum_j \alpha_j^* X_{ji}$$

$$\langle \beta | = (, , ,) = (, , ,) \quad X$$



• $\langle \beta |$ is repes for $(\beta_1^*, \beta_2^*, \dots, \beta_d^*) \leftarrow$ vector linha

• Produto interno?

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \underbrace{\langle \beta |}_{\perp} \sum_i \phi_i \langle \phi_i | \alpha \rangle = \sum_i \beta_i^* \alpha_i$$

$$= (, , ,) \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

• Produto externo?

$$\perp | \beta \rangle \times | \alpha \rangle \perp \quad [\text{como fazer?}]$$

$$= \sum_i \sum_j | \phi_i \rangle \times | \phi_j \rangle \underbrace{\beta_i^*}_{\beta_i} \underbrace{\alpha_j}_{\alpha_j} = \sum_i \sum_j \beta_i^* \alpha_j^* | \phi_i \rangle \times | \phi_j \rangle$$

$$| \phi_1 \rangle \times | \phi_2 \rangle \text{ is repes for } \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & (01000) \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{logo } | \beta \rangle \times | \alpha \rangle \text{ is repes for } \begin{pmatrix} \beta_1 \alpha_1^* & \beta_1 \alpha_2^* & \dots \\ \beta_2 \alpha_1^* & \dots \end{pmatrix}$$

Representação espectral de operadores

$$\|A\| = \sum_{i,j} |\langle \phi_i | A | \phi_j \rangle|$$

Agora escolhemos ~~base~~ base $\{|\phi_i\rangle\}$ de auto-estados de A. Nessa base A é diagonal:

$$\langle \phi_i | A | \phi_j \rangle = \langle \phi_i | A | \phi_j \rangle \delta_{ij} = a_j \delta_{ij}$$

$$\text{onde } A |\phi_j\rangle = a_j |\phi_j\rangle$$

↖ autovalor

$$\Rightarrow A = \sum_{i,j} |\phi_i\rangle \underbrace{\langle \phi_i | A | \phi_j \rangle}_{= a_j \delta_{ij}} \langle \phi_j| = \sum_j a_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j|$$

$$\Rightarrow A = \sum_j a_j P_j \quad \text{onde } P_j \equiv |\phi_j\rangle \langle \phi_j| \text{ é o projetor em } |\phi_j\rangle.$$

• Essa é a representação espectral de A - complica um pouco no caso degenerado e particularmente, no caso ~~de~~ de espectro contínuo.

[ver Ball se 1.3]

Exemplo: spin $\frac{1}{2}$.

- Usamos base de S_z : $\{|+\rangle, |-\rangle\}$:
$$\begin{cases} S_z |+\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle \\ S_z |-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle \end{cases}$$
- Completar: $\mathbb{1} = |+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|$
- Representação espectral de S_z :
$$S_z = \frac{\hbar}{2} |+\rangle\langle+| - \frac{\hbar}{2} |-\rangle\langle-|$$
- Operadores de subida e descida (de S_z):

$$S_+ = \hbar |+\rangle\langle-| \quad S_- = \hbar |-\rangle\langle+|$$

$$\begin{aligned} S_+ |-\rangle &= \hbar |+\rangle\langle-| |-\rangle = \hbar |+\rangle \\ S_+ |+\rangle &= \hbar |+\rangle\langle-| \overset{1}{+}\rangle = 0 \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} S_+ |-\rangle &= \hbar |+\rangle\langle-| |-\rangle = \hbar |+\rangle \\ S_+ |+\rangle &= \hbar |+\rangle\langle-| \overset{1}{+}\rangle = 0 \end{aligned}} \right\} \begin{array}{l} \text{op.} \\ \text{subida} \end{array}$$

$$S_- |-\rangle = 0$$

$$S_- |+\rangle = \hbar |-\rangle\langle+| \overset{1}{+}\rangle = \hbar |-\rangle \quad \left. \vphantom{S_- |+\rangle = \hbar |-\rangle\langle+| \overset{1}{+}\rangle = \hbar |-\rangle} \right\} \text{op. descida}$$

- S_+ e S_- ns ns hermitianos: Ex: $S_+^\dagger = (\hbar |+\rangle\langle-|)^\dagger = \hbar |-\rangle\langle+| \neq S_+$

- Representação matricial:

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- Mais adiante ns ns discutiremos como encontrar representação matricial de ops de spin arbitrário.

Medidas e observáveis

- Vimos no Postulado 1 que o estado de um sist. físico é representado por vetor (ou raio) num espaço vetorial complexo (espaço de Hilbert).
- Desenvolvemos a teoria de operadores lineares, Hermitianos em particular.
- Agora para a representação de medidas (= medições) e seus resultados em MQ.

Postulado 2 (Medidas). As grandezas físicas mensuráveis são representadas por operadores Hermitianos, que chamamos observáveis.

- Os resultados possíveis da medida são os autovalores do observável A correspondente.
- Os resultados são probabilísticos. A probabilidade de sair o resultado a_i é

$$p(a_i) = |\langle \phi_i | \psi \rangle|^2 \quad \text{onde } |\psi\rangle \text{ é o est. do sistema}$$

- O sist. medido é afetado pela medida.
- O est. posterior ~~é a medida~~ A com autovalor a_i é o auto-estado correspondente

$|\phi_i\rangle$ é auto-estado de A correspondente ao autovalor a_i .

$|\phi_i\rangle$

Valor esperado de observável A

Se valores $\begin{cases} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_d \end{cases}$ saem com prob. $\begin{cases} p(a_1) \\ p(a_2) \\ \vdots \\ p(a_d) \end{cases}$, o valor médio $\langle A \rangle$ de várias medições feitas em sistemas no mesmo estado $|\psi\rangle$ é:

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle &= \sum_i p(a_i) a_i = \sum_i |\langle \phi_i | \psi \rangle|^2 a_i \\
 &= \sum_i \langle \phi_i | \psi \rangle \langle \psi | \phi_i \rangle a_i = \sum_i \langle \psi | \phi_i \rangle \langle \phi_i | \psi \rangle a_i \\
 &= \langle \psi | \underbrace{\sum_i a_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i|}_{A} | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle
 \end{aligned}$$

A , na sua representação espectral

- Vemos que o valor médio dos resultados de medidas de A em sistemas idênticos (~~em~~ no est. $|\psi\rangle$) é

$$\boxed{\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle}$$

Postulado 3 (~~Postulado 3~~ Estados pós-medida)

Após medida de A com resultados a_i , o estado do sistema é $|\phi_i\rangle =$ auto-estado de A correspondente a a_i ; independentemente de qual estado tínhamos antes da medida.

OBS:

- 1 - Medidas alteram o sistema, de forma descontínua. Vemos que int. também evoluem de forma contínua, entre medidas.
- 2 - Medidas sucessivas de um mesmo observável A sempre resultam
 - no mesmo resultado (a_i)
 - no mesmo estado $|\phi_i\rangle$.
- 3 - Em geral $\langle A \rangle$ é diferente de todos os autovalores de A . Mas

$$\min(a_i) \leq \langle A \rangle \leq \max(a_i) \leftarrow \text{pelo definição da média.}$$

4. Se $|\psi\rangle$ é normalizado, $\| |\psi\rangle \|^2 = |\langle \psi | \psi \rangle|^2 = 1$.

$$\text{Uno } |\psi\rangle = \sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i | \psi \rangle = \sum_i \langle \phi_i | \psi \rangle |\phi_i\rangle$$

$$\Rightarrow \langle \psi | \psi \rangle = \sum_i \langle \phi_i | \psi \rangle \langle \psi | \phi_i \rangle = \sum_i \underbrace{|\langle \phi_i | \psi \rangle|^2}_{p(a_i)} = 1$$

Vemos que $\sum_i p(a_i) = 1$
 $p(a_i) \geq 0$ } como espinhas dos postulados sobre probabilidades.

Podemos resumir (e generalizar) o Postulado 3 usando operadores de projeção.
 [Párrafo 2.1]

Definição: P é op. de projeção se

1. $P = P^\dagger$ (Hermitiano)

2. $P = P^2$

Exemplo: A) $P = |\psi\rangle\langle\psi|$, pois é Hermitiano e

$$P^2 = |\psi\rangle\langle\psi| |\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = P.$$

B) 1.

1) Se P é op. de projeção, $1-P$ também é.

1. soma (e diferença) de ops. Hermitianos é op. Hermitiano. ✓

2. $(1-P)(1-P) = 1 - P - P + P^2 = 1 - P$ ✓

Teorema: Autovalores de op. de projeção P são 0 ou 1

D) $\{ |d_k\rangle \}$ base, dim d . $K \leq d$.

$$P = \sum_{k=1}^K |d_k\rangle\langle d_k| \text{ é projeção.}$$

Prova: Qualquer autovalor $|\phi_i\rangle$ com autovalor a_i temos: (*)

$$a_i |\phi_i\rangle = P |\phi_i\rangle = P^2 |\phi_i\rangle = (a_i)^2 |\phi_i\rangle \Rightarrow a_i = a_i^2$$

$$(*) P^2 = \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^K |d_i\rangle\langle d_i| \underbrace{\langle d_i | d_j \rangle}_{\delta_{ij}} |d_j\rangle\langle d_j| = \sum_{i=1}^K |d_i\rangle\langle d_i| = P$$

$$\Rightarrow a_i = 0 \text{ ou } 1.$$

- No exemplo D) acima, especificamos um operador que projeta num sub-espaço (de K dimensão) de $\mathcal{H}$.

$$P = \sum_{i=1}^K |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \quad \text{Se } |\psi\rangle = \sum_{i=1}^d c_i |\phi_i\rangle$$

$$\Rightarrow P|\psi\rangle = \sum_{i=1}^K c_i |\psi_i\rangle \quad \leftarrow \text{só "retém" componentes no sub-espaço de } K \text{ dimensão.}$$

Postulado 3b: O estado pós-medida (observável A , resultados a_i , auto-~~estados~~ ^{estados} associados $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots, |\phi_K\rangle$) e'

$$P_{a_i} |\psi\rangle, \quad \text{com } P_i = \sum_{i=1}^K |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = \text{projeta no sub-espaço gerado por } |\phi_1\rangle, \dots, |\phi_K\rangle.$$

Postulado 2b: a probabilidade de obter resultado a_i (em uma situação inicial)

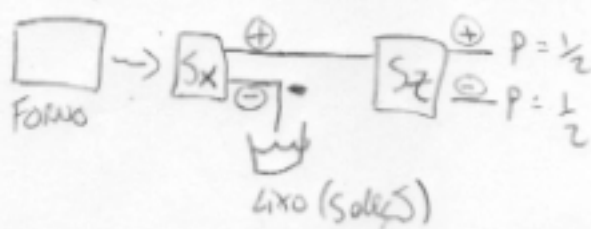
$$\text{e'} } p(a_i) = \|P_i |\psi\rangle\|^2 = \langle\psi| P_i P_i |\psi\rangle = \langle\psi| P_i |\psi\rangle.$$

↑ ~~caso~~ ^{caso} degenerado.

Exemplos: SPIN $\frac{1}{2}$

- Veremos que postulados + S.G. nos dá os auto-estados de S_x e os operadores S_x e S_y .

Lembrando:



Em palavras: auto-estados de S_x com autovalor $+\frac{\hbar}{2}$ ($|\uparrow_x\rangle$) tem prob. $\frac{1}{2}$ de ser medido $|\uparrow_z\rangle$ e $|\downarrow_z\rangle$.

$$\Rightarrow |\langle \uparrow_z | \uparrow_x \rangle| = |\langle \downarrow_z | \uparrow_x \rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

- O ket $|\uparrow_x\rangle$ tem que ser da forma:

$$|\uparrow_x\rangle = \frac{e^{i\phi_1}}{\sqrt{2}} |\uparrow_z\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi_2} |\downarrow_z\rangle$$

- Por conveniência, escolhemos outro ket fisicamente equivalente mas com o 1º coeficiente real: [Lembrando da diferença raio x vetor em 2D]

$$|\uparrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow_z\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi} |\downarrow_z\rangle, \text{ onde } \phi \equiv \phi_2 - \phi_1. \quad (I)$$

- $|\downarrow_x\rangle$ deve ser ortogonal a $|\uparrow_x\rangle$: $|\downarrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow_z\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi} |\downarrow_z\rangle$
 (Nota: Mesma convenção de fase real)
- Com os 2 autovetores de S_x , usamos teorema espectral:

$$S_x = \frac{\hbar}{2} (|\uparrow_x\rangle \langle \uparrow_x| - |\downarrow_x\rangle \langle \downarrow_x|) = \frac{\hbar}{2} (e^{-i\phi} |\uparrow_z\rangle \langle \downarrow_z| + e^{i\phi} |\downarrow_z\rangle \langle \uparrow_z|)$$

~~$\pm \frac{\hbar}{2} (e^{-i\phi} |\uparrow_z\rangle \langle \downarrow_z| + e^{i\phi} |\downarrow_z\rangle \langle \uparrow_z|)$~~ • Repare que S_x é Hermitiano.

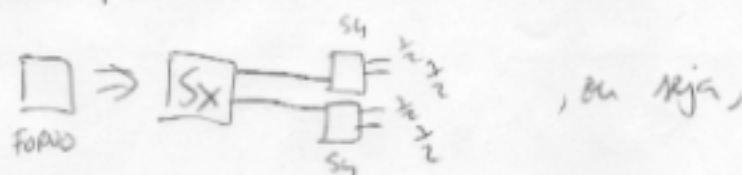
- Fazendo o mesmo raciocínio p/ estado $|\uparrow_y\rangle$ em que medimos S_z :

$$|\uparrow_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow_z\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta'} |\downarrow_z\rangle$$

$$|\downarrow_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow_z\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta'} |\downarrow_z\rangle \quad \text{II}$$

$$\Rightarrow S_y = \frac{\hbar}{2} (e^{-i\delta'} |\uparrow_z\rangle\langle\downarrow_z| + e^{i\delta'} |\downarrow_z\rangle\langle\uparrow_z|)$$

- Como podemos determinar δ, δ' ? Precisamos de mais um experimento:



$$\left. \begin{aligned} |\langle\uparrow_y|\uparrow_x\rangle|^2 &= |\langle\uparrow_y|\downarrow_x\rangle|^2 = \frac{1}{2} \\ \downarrow_y &\quad \downarrow_y &= \frac{1}{2} \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{NS é independente} \\ \text{pela invariância sob} \\ \text{rotações.} \end{array}$$

- Usando eqs. I e II nas expressões acima, obtemos

$$\frac{1}{2} |1 \pm e^{i(\delta-\delta')}| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Satisfeito somente se $\delta' - \delta = \frac{\pi}{2}$ ou $-\frac{\pi}{2}$.

$\Rightarrow$ Vemos que as fases que aparecem em S_x e S_y têm parte imaginária

$\Rightarrow$ se S_x é real, S_y é imaginária.

- Por convenção, S_x é real $\Leftrightarrow \delta = 0 \rightarrow \delta' = \pm \frac{\pi}{2}$.

- A ambiguidade de sinal deve-se à orientação não-especificada dos eixos (regra da mão direita ou esquerda).

$$\hookrightarrow \delta' = \frac{\pi}{2}$$

Permutando $|\uparrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow_z\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow_z\rangle$

$|\downarrow_x\rangle$ -

$|\uparrow_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow_z\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |\downarrow_z\rangle$

$|\downarrow_y\rangle$ -

$$S_x = \frac{\hbar}{2} (|\uparrow_z\rangle\langle\downarrow_z| + |\downarrow_z\rangle\langle\uparrow_z|)$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} (-i|\uparrow_z\rangle\langle\downarrow_z| + i|\downarrow_z\rangle\langle\uparrow_z|)$$

Agora que temos S_z, S_x e S_y podemos definir $\vec{S} \cdot \vec{S} = S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$

É fácil mostrar que $S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$. Para spins maiores que $\frac{1}{2}$, S^2 não é mais proporcional à identidade (11).