



**UNIVERSIDADE DA INTEGRAÇÃO INTERNACIONAL DA LUSOFONIA
AFRO-BRASILEIRA
INSTITUTO DE EXATAS E DA NATUREZA - ICEN
CURSO DE GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

BESNA FERNANDO NDUNGUE

**FORMALISMO MATEMÁTICO DA MECÂNICA QUÂNTICA: O PODER DA
NOTAÇÃO DE BRAS E KETS**

REDENÇÃO

2023

BESNA FERNANDO NDUNGUE

FORMALISMO MATEMÁTICO DA MECÂNICA QUÂNTICA: O PODER DA NOTAÇÃO
DE BRAS E KETS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Física do Instituto de Exatas e da Natureza - ICEN da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, como requisito parcial à obtenção do grau de Licenciatura em Física.

Orientador: Prof. Dr. João Philipe Macedo Braga

REDENÇÃO

2023

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira
Sistema de Bibliotecas da UNILAB
Catalogação de Publicação na Fonte.

N'dungue, Besna Fernando.

N337f

Formalismo matemático da mecânica quântica: o poder da notação de Bras e Kets / Besna Fernando N'dungue. - Redenção, 2023.
71fL: il.

Monografia - Curso de Física, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Redenção, 2023.

Orientador: Prof.º Dr.º João Philipe Macedo Braga.

1. Notação de Dirac. 2. Mecânica Quântica. 3. História da Ciência. I. Braga, João Philipe Macedo. II. Título.

CE/UF/BSCA

CDD 530.15

BESNA FERNANDO NDUNGUE

FORMALISMO MATEMÁTICO DA MECÂNICA QUÂNTICA: O PODER DA NOTACÃO
DE BRAS E KETS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao
Curso de Graduação em Física do Instituto de
Exatas e da Natureza - ICEN da Universidade
da Integração Internacional da Lusofonia Afro-
Brasileira, como requisito parcial à obtenção do
grau de Licenciatura em Física.

Aprovada em: 27/01/2023

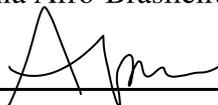
BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. João Philipe Macedo Braga (Orientador)
Universidade da Integração Internacional da
Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)



Prof. Dr. Aristeu Rosendo Pontes Lima
Universidade da Integração Internacional da
Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)



Prof. Ms. Antônio Isael Paz Pires
Universidade Federal do Ceará (UFC)

AGRADECIMENTOS

É importante deixar claro que a ordem seguida neste agradecimento não tem nada a ver com a questão da importância.

Aos meus pais, Fernando Ndungue e Ilessa Lima que sempre estiveram ao meu lado me dando suporte ao longo de toda a minha trajetória. Aos meus irmãos que sempre me apoiaram e priorizaram a minha formação acadêmica. Ainda os agradeço pela amizade, proteção e atenção dedicadas quando sempre precisei.

Ao meu mano João Armando Tchami, pelos ensinamentos, conselhos e pela confiança, atenção ao longo desse tempo, talvez sem conhecê-lo não estaria aonde estou hoje. Declaro aqui a minha eterna gratidão pela partilha do seu tempo e conhecimento, bem como da sua amizade.

Ao meu Prof. Dr. João Philipe Macedo Braga, pela sugestão do tema e por toda contribuição, paciência e confiança que depositou em mim no desenvolvimento deste trabalho. À universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, UNILAB, e aos demais funcionários desta instituição que contribuíram para realização do meu sonho de ser Licenciado em Física.

À minha namorada Nelita Francisco Caperuto e ao meu filho Benjamin pela compreensão e paciência que demonstraram nas várias horas que estive ausente ao longo de produção deste trabalho. Aos meus familiares que me apoiaram de forma direta ou indireta, pois são muitos, que não dá para citar nominalmente todos, no entanto deixo aqui a minha gratidão. Também agradeço a meu amigo irmão Midana Baial Sambú que sempre me ajudou com sua vasta experiência no desenvolvimento deste trabalho.

Por fim, mas não menos importante, agradeço a todos que conheci durante esse percurso, em especial aos meus colegas de entrada 2018.1, da equipe da seleção de comunidade guineense na UNILAB e para fechar estendo os meus agradecimento aos colegas do curso, pela oportunidade do convívio e pela cooperação mútua durante estes anos.

RESUMO

A notação na Mecânica Quântica é de fundamental importância. E a notação de bras e kets é uma das abordagens matemáticas que pode ser usada para caracterizar a matemática da Mecânica Quântica. Neste trabalho buscamos apresentar esta notação de maneira detalhada e como ela é usada dentro da Mecânica Quântica. Para isso, fizemos a representação matricial de um operador qualquer X e estudamos a questão da medição. Com ajuda da relação da completeza conseguimos fazer a mudança de base, as representações dos estados quânticos e as suas dinâmicas temporais, culminando com a escrita da equação de schrödinger derivada do operador de evolução temporal. Concluimos que trabalhar com a notação de Dirac facilita o cálculo, pois ela reduz drasticamente a extensão do cálculo e pode ser usada para fazer cálculo sem se referir a uma base específica. Permite ainda aplicação do formalismo da MQ para as situação onde apenas a função de onda espacial não seria suficiente como por exemplo no estudo do spin do elétron. Neste caso, a função de onda não consegue representar o estado quântico do spin, ela nos fornece apenas a probabilidade de encontrar uma partícula numa determinada região do espaço.

Palavras-chave: Notação de Dirac. Mecânica Quântica. História da Ciência.

ABSTRACT

The question of notation in Quantum Mechanics is of fundamental importance. And the notation of bras and kets is one of the mathematical approaches that can be used to characterize the mathematics of Quantum Mechanics. In this paper we seek to present this notation in a detailed way and how it is used within Quantum Mechanics. To do this, we made the matrix representation of any operator X and studied the question of measurement. With the help of the completeness relation we were able to do the change of basis, the representations of quantum states and their time dynamics, culminating with the writing of the schrödinger equation derived from the time evolution operator. we conclude that working with Dirac's notation facilitates the calculation, since it drastically reduces the length of the calculation and can be used to do calculation without referring to a specific basis. It also allows the application of the QM formalism to situations where the wave function alone would not be sufficient, for example in the study of electron spin. In this case, the wave function cannot represent the quantum state of spin, it only gives us the probability of finding a particle in a particular region of space.

Keywords: Dirac notation. Quantum Mechanics. History of Science.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Nova notação de Dirac	15
Figura 2 – Experimento de Stern-Gerlach	17
Figura 3 – (a) Previsão da física clássica, (b) o resultado encontrado no experimento . .	18
Figura 4 – Experimento de Stern-Gerlach em sequência	19
Figura 5 – Medição seletiva	31
Figura 6 – Medição seletiva sequenciais	35
Figura 7 – Translação sucessivas em direções ortogonais	54

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
1.1	Breve História da Mecânica Quântica	11
1.2	Origem histórica da notação de bras e kets	13
1.3	Escopo do trabalho	15
2	NOTAÇÃO DE BRAS E KETS	17
2.1	O Experimento de Stern-Gerlach	17
2.2	Kets, Bras e Operadores	19
2.2.1	<i>Kets</i>	<i>20</i>
2.2.2	<i>Bras e produto internos</i>	<i>21</i>
2.3	Kets de base e Representação Matriciais	22
2.3.1	<i>Autovalores de um observável</i>	<i>22</i>
2.3.2	<i>Autovetores como kets de base</i>	<i>24</i>
2.3.3	<i>Representação Matricial</i>	<i>26</i>
2.4	Medidas, Observáveis e Relação de Incerteza	30
2.4.1	<i>Medidas</i>	<i>30</i>
2.4.2	<i>O Valor Esperado de um Observável A ou Valor Médio</i>	<i>32</i>
2.4.3	<i>Observáveis</i>	<i>33</i>
2.4.4	<i>Relações de Incerteza</i>	<i>36</i>
2.5	Mudança de Base	41
2.5.1	<i>Matriz de transformação</i>	<i>43</i>
2.5.2	<i>Observáveis equivalentes unitários</i>	<i>45</i>
3	TRANSLAÇÃO ESPACIAL	47
3.1	Posição, Momento e translação	47
3.1.1	<i>Espectros contínuos</i>	<i>47</i>
3.1.2	<i>Autovetores de posição e medidas de posição</i>	<i>47</i>
3.1.3	<i>Translação</i>	<i>49</i>
3.1.4	<i>Momento como gerador da translação</i>	<i>52</i>
3.2	Funções de onda no espaço de posição	56
3.2.1	<i>Operador momento na base de autovetor de posição</i>	<i>58</i>
4	EVOLUÇÃO TEMPORAL	60

4.1	Evolução Temporal e Equação de Schrödinger	60
4.1.1	<i>Operador evolução temporal</i>	60
4.1.2	<i>Equação de Schrödinger</i>	63
5	CONCLUSÃO	64
	REFERÊNCIAS	65
	APÊNDICES	67
	APÊNDICE A – Precessão de Spin	67

1 INTRODUÇÃO

1.1 Breve História da Mecânica Quântica

A Física Quântica, hoje denominada de velha Mecânica Quântica (MQ) surgiu a partir da segunda metade do século XIX. A primeira grande descoberta, certamente, que transformou a Física, culminando com a criação da mecânica MQ na década de 1920 foi a da quantização de energia, no primeiro ano do século, por Max Planck. Ele chegou a este avanço na tentativa de explicar os dados experimentais de Lummer Pringshein e de Rubens Kurlbaum a respeito do espectro de radiação dos corpos aquecidos (em especial, do chamado “corpo negro”, que absorve toda radiação incidente) [1]. A partir daí as pesquisas se intensificaram, chegando a descobertas importantes e aplicações envolvendo partículas elementares, como o modelo quântico do átomo, de Niels Bohr; a teoria da dualidade onda-partícula para a matéria, de Louis De Broglie, só para citar alguns exemplos[2].

Em 1897, J. J. Thomson, descobriu o elétron [3]. Em seguida sugeriu que os elétrons deviam ser parte integrante do átomo. Visto que o átomo é neutro, para compensar a carga negativa dos elétrons, concluiu que teria que haver também uma carga positiva [4]. Em 1898, ele propôs seu modelo atômico. Nele o átomo seria composto de elétrons distribuído numa esfera carregada positivamente onde os elétrons negativos vibrariam, ocupando átomo inteiro [4]. As investigações continuaram, em 1911, Rutherford através de experimentos descobriria que o átomo é constituído por um núcleo pequeno positivo. Então, ele propôs um novo modelo. Nesse modelo o átomo possuía um pequeno núcleo maciço com carga positiva, em torno do qual orbitavam apenas alguns elétrons, como se o átomo fosse um sistema solar em miniatura [4].

Entretanto, o modelo de Rutherford para o átomo seria instável, pois segundo o eletromagnetismo clássico as cargas elétricas aceleradas irradiam energia. Uma vez que os elétrons são partículas eletricamente carregadas e giram em torno do núcleo, então desenvolvem movimentos acelerados (recordando que movimento circular possui aceleração em direção ao centro) com a irradiação dos elétrons, isso implicaria na perda de energia consequentemente, colapsariam sobre o núcleo. Então, Bohr propôs em 1913 o seu modelo, supondo que no mundo atômico não se aplicariam as leis de física que descrevem o mundo macroscópico. De acordo com [4], na virada do século XIX para o XX, Max Planck já havia introduzido o conceito de energia discreta para descrever o processo de interação entre radiação e a matéria. E o renomado físico Albert Einstein atribuiu à luz o caráter de partícula, que viria a ser chamado de

fóton. Com essas noções Bohr aperfeiçoou o modelo de Rutherford, supondo a quantização da energia [5]. Segundo ele, o elétron só poderia se mover em determinados orbitais associadas a números inteiros ($n = 1, 2, 3, \dots$) com ganho de energia o elétron daria um salto para um nível mais afastado do núcleo e a emissão de um fóton implicaria que o elétron retorna à órbita de menor energia. O sucesso desse modelo impulsionou várias pesquisas que culminaram com a formulação da Mecânica Quântica [4].

No entanto, até início de 1925 não se pode afirmar que existia uma MQ propriamente dita [2]. Vários trabalhos foram desenvolvidos por diferentes autores, mas para cada problema era usado um método diferente como afirma [2]. A teoria quântica havia se desenvolvido sob a forma de trabalhos de natureza incompleta, tentando resolver problemas particulares como a radiação do corpo negro, o calor específico dos sólidos, o espectro descontínuo de hidrogênio, e outras questões semelhantes. Para cada problema eram desenvolvidos novos métodos, não existindo uma teoria básica da qual tudo pode ser deduzido [2].

Entretanto, a MQ conhecida hoje foi criada nos anos 1925 e 1926, através de diversos trabalhos que foram desenvolvidas de forma paralela e que obtiveram resultados positivos. De acordo com [3]. Por um lado, os trabalhos de Werner Heisenberg complementados por Max Born e Pascual Jordan levaram à criação da chamada “mecânica matricial”, que procurava calcular grandezas diretamente mensuráveis (como os comprimentos de ondas, intensidade e polarização de linhas espectrais) utilizando método baseado em matrizes. Por outro lado, Erwin Schrödinger, independentemente desses pesquisadores, partindo do trabalho de Louis De Broglie (1924) sobre ondas associadas a partículas, desenvolveu a “mecânica ondulatória”, na qual interpretava os diversos estados atômicos e moleculares associadas aos elétrons, que por sua vez eram considerados como objetos extensos (não pontuais), com sua carga distribuída pelo espaço.

Um terceiro desenvolvimento, também na mesma época, foi o trabalho de Paul Dirac, que possuía um caráter mais abstrato e maior semelhança com mecânica matricial, tendo sido inspirado pelo primeiro trabalho de Heisenberg. Ainda no mesmo período, Max Born e Norbert Wiener desenvolveram uma quarta abordagem, utilizando operadores, um método que não era equivalente à mecânica matricial, permitindo estudar fenômenos não periódicos. Embora os trabalhos tenham sido desenvolvidos no mesmo período, tudo se desenrolou de forma independente. Esse trabalhos foram fundamentais para a criação da MQ. Como corrobora [6], a MQ atualmente ensinada e utilizada pelos pesquisadores não é a teoria de Heisenberg, Born e Jordan, nem a teoria de Dirac, nem a de Schrödinger. Ela é uma teoria que reúne alguns aspectos de cada uma

dessas teorias.

1.2 Origem histórica da notação de bras e kets

Nascido em 1902, em Bristol, Inglaterra, Paul Adrien Maurice Dirac foi o único inglês que contribuiu significativamente na fase inicial de desenvolvimento da Mecânica Quântica [6]. Formou-se pela universidade de Bristol em 1921 e doutorou-se pela universidade de Cambridge [4]. Foi em Cambridge onde conheceu Ralph H. Fowler, que se dedicava à Mecânica Estatística e à teoria atômica quântica. Dirac viria a se interessar por novos estudos da física quântica. Um dos principais problemas que assombrava os físicos no final do século XIX e início do XX que procuravam explicar a estrutura da matéria com base na Mecânica Clássica e eletromagnetismo era a estabilidade de sistemas atômicos [7].

Com cargas em movimento e considerando a visão clássica, esperava-se que os átomos perdessem a energia depois de irradiassem. No entanto, eles eram estáveis e só emitiam (absorviam) radiação em circunstâncias específicas [7]. Como citado anteriormente Niels Bohr deu explicação a esse fenômeno. Afirmou que os sistemas atômicos não obedeciam a dinâmica clássica. Abordou a questão de estados estacionários e que cada estado teria a sua energia específica e constante. Seguindo essa abordagem, várias teorias quânticas foram formuladas na segunda e terceira década do século XX [7]. Com a formulação da mecânica matricial por Heisenberg, Born e Jordan, em 1925, onde as quantidades de posição, velocidade ou energia passaram a ser representados por um conjunto infinito de números. Como afirma [7], Matrizes infinitamente dimensionais cujas linhas e colunas eram rotulados pelos números quânticos da antiga teoria quântica. Assim, os estados estacionários de Bohr passaram a corresponder formalmente às linhas e colunas das matrizes infinitas. A energia era representada neste esquema por uma matriz diagonal, cujo elemento genérico não nulo E_{mn} era igual à energia n-ésimo estado estacionário [7]. Essa representação matricial não contribuiu muito para o entendimento da noção de estado estacionário, entretanto, substanciou a noção de que as descrições clássicas não podiam ser usadas para sistema atômico.

Em 1926, Schrödinger propôs uma nova teoria, mecânica ondulatória, cujo elemento chave era a conhecida hoje como a equação de Schrödinger. O mais importante nessa equação era que: Suas soluções podiam ser classificadas em termos de números inteiros com os mesmos valores que os números quânticos do átomo de hidrogênio da teoria de Bohr [7]. Equações semelhantes poderiam ser escritas também para os sistemas quânticos mais complexos que o

átomo de hidrogênio. Portanto, na mecânica ondulatória, os estados estacionários poderiam ser descritos por um formalismo matemático que previsse os valores dos números quânticos e não dependesse de condições quânticas impostas externamente. Assim a busca por uma teoria que interpretasse os sistemas atômicos continuou. Born deu passo importante ao propor a interpretação probabilística [6], o que desencadeou várias outras pesquisas nessa direção. Dois nomes se destacaram: Jordan e Dirac. Vamos dedicar ao trabalho de Dirac.

No seu artigo publicado em 1927 sobre “A Interpretação física da dinâmica quântica”, Dirac observou que a mecânica quântica fornecia menos informações sobre a evolução de um sistema do que a Mecânica Clássica [7] uma vez que os valores das coordenadas q e momento p não podiam ser determinados ao mesmo tempo. Para solucionar esta questão, Dirac propôs as funções de transformações e suas notações. Elas transformavam uma matriz associada a um quantidade g com linhas e colunas etiquetadas pelos valores das quantidades a_r numa matriz ainda associada a g , porém com linhas e colunas etiquetadas por outro conjunto de quantidade a_r . Com sua notação, Dirac abriria um espaço totalmente novo de operações físico-matemáticas e de potencial significado físico-matemático [7].

Outro físico que contribuiu também no endireitamento tanto da parte matemática quanto da física da mecânica quântica foi Von Neumann com seu trabalho “Os fundamentos da mecânica quântica” onde analisou as formulações anterior da mecânica quântica (Mecânica Ondulatória, Matricial e teoria de transformação) desenvolvidas por Heisenberg, Born, Jordan, Schrodinger e Dirac respectivamente. segundo [7], ele ofereceu a esses trabalhos uma definição rigorosa das estruturas matemáticas que possuíam exatamente essas características: estes seriam os fundamentos matemáticos da mecânica quântica. Definiu um novo objeto matemático: o espaço abstrato de Hilbert, cujos elementos (vetores) não eram números nem funções, mas podiam ser adicionados e multiplicados seguindo um conjunto de axiomas que, como era de se esperar, se assemelhava muito à forma como as funções das ondas podiam ser adicionadas e multiplicadas.

A notação é uma questão de primordial importância na história e filosofia da filosofia natural pré-moderna e da ciência moderna [7]. Um exemplo evidenciando isso é a atenção dada pelo Dirac a esta questão. No seu artigo publicado em julho de 1939, ele afirma que “uma boa notação pode ser de grande valor para ajudar no desenvolvimento de uma teoria, facilitando a anotação daquelas quantidades ou combinações de quantidades que são importantes, e difíceis ou impossíveis de anotar aquelas que são insignificantes”.

A nova notação introduzida por Dirac apesar de resolver vários problemas da mecânica quântica mais tarde ela foi proposta para resolver problemas em especial de vetor no espaço abstrato de Hilbert. De acordo com [8], a notação usada atualmente na mecânica quântica é bastante adequada aos seus propósitos, mas com alguns inconvenientes. É preciso lidar com vetores no espaço de Hilbert, representando os estados de um sistema dinâmico, variáveis dinâmicas, etc. Esta nova notação possibilitou a resolução da questão de que não se podia, numa formulação rigorosa de espaço abstrato de Hilbert, pegar o produto de dois vetores para obter um número [7]. Na nova notação o complexo conjugado desempenha esse papel. Este problema foi contornado através de truques simbólicos segundo [8], “temos também que lidar com outro tipo de vetor de espaço de Hilbert, o complexo conjugado do primeiro tipo. Isto foi denotado na antiga notação por φ ou $[\psi$ com uma barra no topo], e agora será denotada por \langle . Se um deles é especificado por uma etiqueta a , nós escrevemos $\langle a|$.

A mudança de notação e os significados físico-matemático de cada um deles foi dado por [7], Os novos símbolos $\langle a|$ e $|a\rangle$ transmitiram não só uma mensagem visual, mas também uma mensagem tátil, qualquer quantidade entre parênteses é um número, e qualquer expressão que contenha um símbolo de parênteses não fechado \langle ou \rangle é um vetor no espaço de Hilbert. A figura 2 mostra as substituições feitas por Dirac.

Figura 1 – Nova notação de Dirac

$\alpha\psi$	$\alpha\rangle$
$\alpha\psi_a$	$\alpha a\rangle$
$\phi\alpha$	$\langle\alpha$
$\phi_a\alpha$	$\langle a \alpha$
$\phi_a\alpha\psi$	$\langle a \alpha\rangle$ or $\langle a \alpha $
$\phi\alpha\psi_a$	$\langle\alpha a\rangle$ or $\langle \alpha a\rangle$
$\phi_a\alpha\psi_b$	$\langle a \alpha b\rangle$
$\phi(q')\alpha\psi(q'')$ or $(q' \alpha q'')$	$\langle q' \alpha q''\rangle$.

Fonte: Dirac

1.3 Escopo do trabalho

O objetivo deste trabalho é apresentar a notação de bras e kets e como ela é estudada na MQ. Pois, ela é uma notação poderosa, visto que reduz a extensão de cálculo e possibilita

fazer cálculo sem se referir a uma base específica. Ainda no que diz respeito ao seu poderiu, essa notação permite aplicação do formalismo da MQ para situações onde apenas a função de onda não seria suficiente como por exemplo no caso de estudo do spin do elétron. Como será demonstrado no apêndice deste trabalho.

Este trabalho está dividido em 5 capítulos. A divisão foi feita com o objetivo de facilitar o entendimento do leitor dos conteúdos que foram desenvolvidos de forma sequencial, tendo uma certa dependência uma após outra.

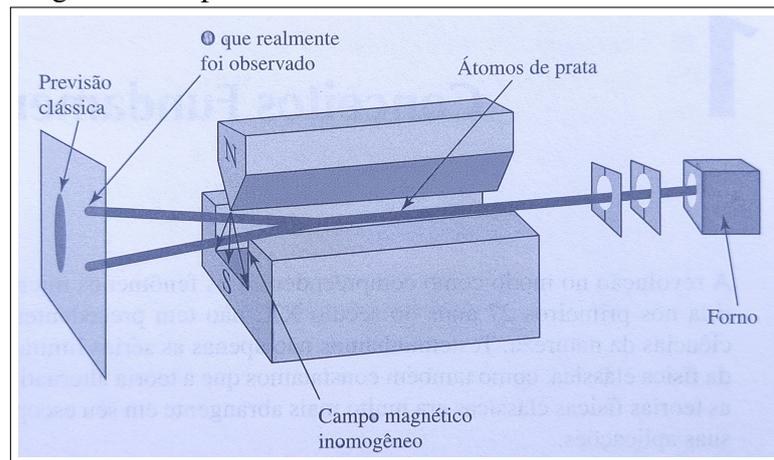
Vimos no capítulo 1 uma breve historial sobre a MQ; a história sobre a origem da notação de bras e kets e sua importância; o objetivo deste trabalho e bem como sua organização geral. No capítulo 2, faremos um estudo inicial da notação, onde usaremos os kets de base para fazer a representação matricial do observável. Ainda propomos discutir a noção da comutatividade que nos possibilita abordar a relação de incerteza, em seguida tratamos da mudança de base. No capítulo 3, será abordado o conceito de translação, onde definimos o operador translação infinitesimal e discutimos as propriedades que ele deve obedecer, ainda usamos delas para encontrar um operador escrito em função do momento. Por fim, apresentamos um estudo sobre as propriedades da função de onda nos espaços da posição. Já no capítulo 4, investigamos como é que um sistema físico se comporta com o tempo, assim conseguimos mostrar que a Equação de Schrodinger é uma consequência de operador evolução temporal. Finalmente no capítulo 5, apresentamos as nossas conclusões do trabalho.

2 NOTAÇÃO DE BRAS E KETS

2.1 O Experimento de Stern-Gerlach

Para uma melhor compreensão dos conceitos das seções a seguir, iniciaremos com a discussão de um dos experimentos mais famosos de início da Mecânica Quântica. Experimento esse que permitiu a observação da quantização do momento angular e a existência de um momento angular intrínseco do elétron, hoje conhecido como Spin [9]. O experimento de Stern-Gerlach proposto por O. Stern em 1921 e realizado em colaboração com W. Gerlach [10]. Ele permite a descrição de alguns fenômenos mais básicos da MQ, pois a parte relevante para uma descrição inicial do sistema pode ser representada pela combinação linear de dois estados (spin up e down) [11]. A discussão dele será feita a luz da Mecânica Quântica.

Figura 2 – Experimento de Stern-Gerlach



Fonte: Sakurai: Mecânica Quântica Moderna

A montagem do experimento consiste em um forno em que aquece e vaporiza, um colimador por onde passa átomos aquecidos e um campo magnético não-homogêneo produzido por um ímã, um anteparo onde é registrado os átomos, como ilustrado na figura 2. Para realização do experimento, foi aquecido átomos de prata em um forno, que possui um pequeno orifício através do qual podia sair o feixe passando por um colimador (que permite feixes saírem de forma linear), e estes são submetidos à ação de um campo magnético variado. A escolha do químico prata (Ag) não foi aleatório [12]. Átomos de prata (Ag) possuem 47 elétrons, das quais 46 deles formam uma distribuição de carga esfericamente simétrica e o 47º elétron se encontra no orbital $5s^1$ [13]. ou seja, ignorando o spin nuclear dos átomos, é possível verificar que o momento angular de todo o átomo de prata provém apenas do momento angular de spin do 47º elétron

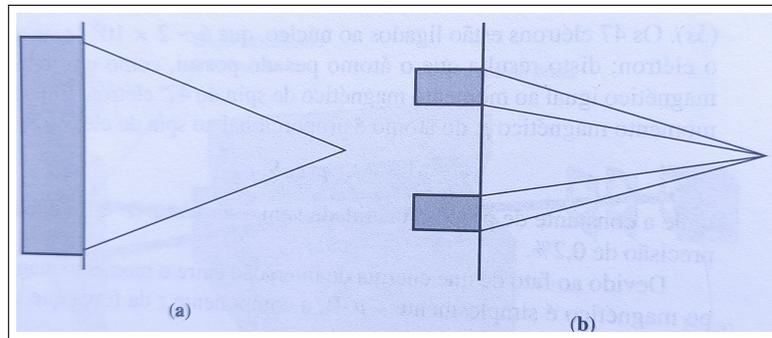
[9]. Então, temos que a energia de interação entre o momento magnético do átomo μ e o campo magnético \vec{B} é o produto escalar $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$. Logo, ao passarem pelo campo magnético, as partículas estão sujeitas a uma força \vec{F} na direção Z dada por

$$\vec{F} = \nabla(\vec{\mu} \cdot \vec{B}), \quad (2.1)$$

como o campo está só na direção z, a componente z da força que o átomo sente é dada por

$$\vec{F}_z = \frac{\partial}{\partial z}(\mu \cdot B) \simeq \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}. \quad (2.2)$$

Figura 3 – (a) Previsão da física clássica, (b) o resultado encontrado no experimento



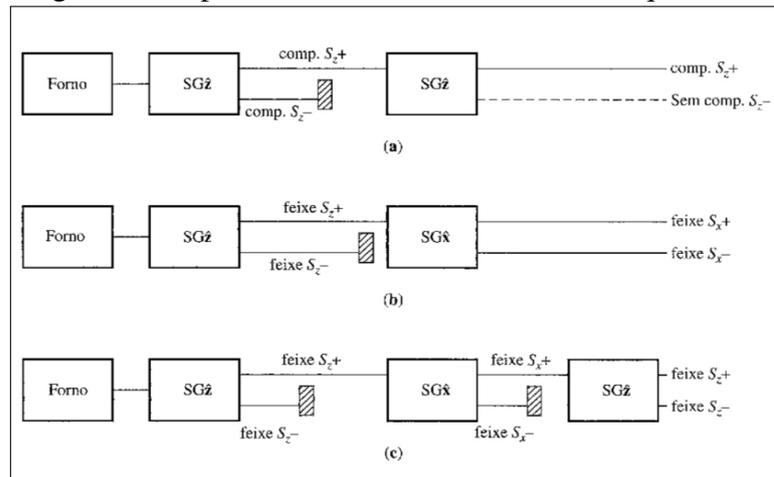
Fonte: Sakurai: Mecânica Quântica Moderna

Depois que o feixe passa pelo aparato de Stern-Gerlach, ele colide com um anteparo, onde as informações sobre a posição de chegada do átomo são coletadas. Como a força está relacionada ao valor μ_z , neste caso, a partícula será deflexionada para cima se $\mu > 0$ e para baixo se $\mu < 0$. De acordo com a Mecânica Clássica, era esperado que o padrão dos feixes observado no anteparo fosse uma linha distribuída uniformemente na direção \hat{z} , ou seja, que os valores de μ_z variassem entre $|\mu|$ e $-|\mu|$. Ao invés disso, o padrão observado no anteparo foi de duas manchas que correspondem a uma orientação para cima e outra para baixo, como mostrado na figura 3. E isto indicou que o momento angular é na verdade quantizado. Do ponto de vista da Física Clássica, esta divisão do feixe em duas manchas é muito estranho e difícil de explicar [14]. O resultado do experimento foi um sucesso, visto que conseguiu demonstrar que o momento magnético dos átomos era quantizado.

Vamos verificar o que ocorre quando passamos por sucessivos aparatos de Stern-Gerlach, pois ele ajudará no melhor entendimento sobre o que acontece nas medidas e a respeito do colapso da função de onda, assuntos que serão discutidos posteriormente. Suponha que um aparato de experimento de Stern-Gerlach foi montado em sequência, em outras palavras, o feixe

passa por dois ou mais aparatos, conforme a figura 04, em que o segundo aparato recebe somente um dos feixes que emerge do primeiro aparato $SG_{\hat{z}}$. O feixe S_{z+} . se foi colocados dois aparatos de medida com a mesma direção, por exemplo \hat{Z} , o resultado do segundo será 100 % S_z , significa que obtemos a mesma informação do resultado anterior. Suponha agora que temos aparato disposta nas direções perpendiculares $SG_{\hat{z}}$ e $SG_{\hat{x}}$ obteremos do segundo aparato 50 % S_{z+} e 50 % S_{z-} na direção $SG_{\hat{x}}$. é submetido a outro aparato $SG_{\hat{z}}$. Considere agora o terceiro aparato, conforme a figura 4, na direção $SG_{\hat{z}}$, lembrando que dois primeiros aparatos estão nas direções $SG_{\hat{z}}$ e $SG_{\hat{x}}$, respectivamente. observamos que do terceiro aparato a medida gerará 50 % S_{z+} e 50 %, ou seja, a medida na $SG_{\hat{x}}$ destruiu a informação quanto à direção $SG_{\hat{z}}$. Este resultado nos permitirá entender melhor porque que na MQ, não podemos determinar $S_{z+}S_{z-}$ simultaneamente.

Figura 4 – Experimento de Stern-Gerlach em sequência



Fonte: Sakurai: Mecânica Quântica Moderna

2.2 Kets, Bras e Operadores

Nesta seção discutiremos os fundamentos e as principais regras da formulação da MQ. Dirac propõe um formalismo matemático para a MQ pensando mais em elegância e facilidade do uso, formalismo esse que assumirá forma de postulados. O conjunto desses postulados acomodará as observações feitas até o momento, e ajudará, e será capaz de prever, resultados de uma medida [15]. A linguagem matemática que será usado como base para a discussão da teoria quântica do processo de medida deriva da álgebra linear.

2.2.1 Kets

Supomos um espaço vetorial complexo tendo a dimensão dependendo da natureza do sistema físico. Por exemplo, o aparato de SG, que contém um único grau de liberdade que será abordado quanticamente, a dimensionalidade é determinada através de números de caminhos possíveis. No caso em questão, a dimensionalidade é simplesmente dois.

Na MQ o estado físico de um sistema é representado por um vetor de estado em um espaço vetorial complexo. A esses vetores Dirac nomeou de Kets, e denotado por $|\rangle$, donde que um ket específico pode ser denotado se inserindo um rótulo no seu interior, por exemplo, $|\alpha\rangle$.

Como postulado temos, primeiro o ket de estado $|\alpha\rangle$ contém toda a informação a respeito do estado físico. Os kets podem ser somados:

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle. \quad (2.3)$$

O resultado da soma $|\gamma\rangle$ é também um novo ket. É possível também multiplicar um ket pelo número complexo c , resultando em um produto do tipo $c|\alpha\rangle$ é outro ket.

$$c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c = |\delta\rangle, \quad (2.4)$$

para $c=0$ temos que

$$0|\alpha\rangle = |\alpha\rangle 0 = 0. \quad (2.5)$$

Como segundo postulado temos que, os kets $|\alpha\rangle$ e $c|\alpha\rangle$, para $c \neq 0$, representa o mesmo estado físico. Uma constante não altera a direção de um vetor no espaço vetorial. Observáveis, são quantidades físicas mensuráveis representados por operadores. Representaremos operadores associados aos observáveis pelas letras A e B, um operador atuando pela esquerda sobre um ket,

$$A \cdot (|\alpha\rangle) = A|\alpha\rangle, \quad (2.6)$$

e o resultado é um ket. A notação $A|\alpha\rangle$ geralmente não é produto de um constante com o ket inicial. No entanto, quando essa multiplicação acontece teremos a equação de autovetores de um dado operador A dado assim

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle, \quad (2.7)$$

em que a' é apenas um número, para um conjunto de finito ou infinito de Autovetores-autovalores podemos representar por

$$\{|a'\rangle, |a''\rangle, \dots, |a^n\rangle\} \quad (2.8)$$

sendo que

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle \quad (2.9)$$

$$A|a''\rangle = a''|a''\rangle, \quad (2.10)$$

por fim a', a'', \dots sendo complexo. Temos o conjunto dos números

$$\{a'\} \equiv \{a', a'', \dots, a^n, \dots\} \quad (2.11)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} A \leftrightarrow \text{operador associado a um observável} \\ a \leftrightarrow \text{autovalor do operador } A \\ |a\rangle \leftrightarrow \text{autovetor ou autoestado do operador } A \end{array} \right. \quad (2.12)$$

O estado físico que corresponde a um autovetor é denominado de autoestado.

Já discutida anteriormente a dimensionalidade do espaço vetorial que fica determinado através de possíveis caminhos. Portanto, se a dimensão do espaço for N o espaço vetorial conterá uma base com n autoestado do operador A . Qualquer ket $|\alpha\rangle$ poderá então ser escrito como

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle, \quad (2.13)$$

com a', a'', \dots, a^n , onde $c_{a'}$ é um coeficiente complexo.

2.2.2 Bras e produto internos

É possível associar ao espaço vetorial ket, os vetores duais. Postula-se que para cada ket $|\alpha\rangle$ existe um bra, denotado por $\langle\alpha|$, associado, de tal forma que o bra dual a $c|\alpha\rangle$ é $c^*\langle\alpha|$:

$$c_\alpha |\alpha\rangle + c_\beta |\beta\rangle \longleftrightarrow c_\alpha^* \langle\alpha| + c_\beta^* \langle\beta|. \quad (2.14)$$

O simbolo \longleftrightarrow significa correspondência dual. É importante ressaltar que o bra dual à $c|\alpha\rangle$ é $c^*\langle\alpha|$ e não $c\langle\alpha|$. O produto interno entre um bra e um ket fica definido como:

$$\langle\beta|\alpha\rangle = (\langle\beta|) \cdot (|\alpha\rangle), \quad (2.15)$$

refere-se, a um número complexo este resultado. O primeiro postulado a respeito das propriedades do produto interno é que $\langle \alpha | \beta \rangle$ e $\langle \beta | \alpha \rangle$ são complexo conjugado um do outro, ou seja:

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^*. \quad (2.16)$$

O segundo, conhecido como a métrica da positividade, diz que $\langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0$, só é válida a igualdade quando $|\alpha\rangle$ for ket nulo. Este postulado é muito importante visto que é usado na interpretação probabilística da MQ. Dois kets $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ são denominados de ortogonais se

$$\langle \beta | \alpha \rangle = 0. \quad (2.17)$$

Para a normalização, dado um ket que o não ket nulo, podemos normalizá-lo da seguinte forma:

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}} \right) |\alpha\rangle, \quad (2.18)$$

tal que

$$\langle \tilde{\alpha} | \alpha \rangle = 1. \quad (2.19)$$

2.3 Kets de base e Representação Matriciais

2.3.1 Autovalores de um observável

Agora vamos focar o nosso estudo nos autovalores e autovetores de operadores hermitianos e sua representação matricial. Para evitar a confusão entre operador geral X com operador hermitiano, vamos representar os hermitianos por letras maiúsculas de iniciais alfabetos. Suponha que \hat{A} seja operador hermitiano. Sabemos que os operadores hermitianos obedecem as seguinte propriedade:

$$\langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle = \langle \beta | \hat{A} | \alpha \rangle^*, \quad (2.20)$$

isso ocorre quando $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$. Para que o presente operador seja hermitiano, vamos ver o que acontece com seus autovetores e autovalores.

$$\hat{A} | a \rangle = a | a \rangle \longleftrightarrow \langle a | \hat{A}^\dagger = a^* \langle a|. \quad (2.21)$$

Onde $|a\rangle$ é autovetor, a é autovalor e o simbolo \longleftrightarrow assumimos que é a correspondência dual (CD). Multiplicando ambas as partes da CD por $\langle a|$ e $|a\rangle$, respectivamente, temos

$$\langle a|\hat{A}|a\rangle = \langle a|a|a\rangle \longleftrightarrow \langle a|\hat{A}^\dagger|a\rangle = \langle a|a^*|a\rangle. \quad (2.22)$$

Agora vamos trabalhar a equação (2.22) em partes, começando com,

$$\langle a|\hat{A}|a\rangle = a\langle a|a\rangle \quad (2.23)$$

e

$$\langle a|\hat{A}^\dagger|a\rangle = a^*\langle a|a\rangle \quad (2.24)$$

Subtraindo a equação (2.23) por (2.24), vem

$$\langle a|(\hat{A} - \hat{A}^\dagger)|a\rangle = (a - a^*)\langle a|a\rangle, \quad (2.25)$$

como $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, então

$$(a - a^*)\langle a|a\rangle = 0. \quad (2.26)$$

Agora vamos analisar a equação em duas vertentes. Primeiro assumindo que a e a sendo os mesmos autovalores, deduzimos a condição que os autovalores são reais [9].

$$a = a^* \quad (2.27)$$

Agora vamos assumir por hipótese que $a \neq a$, consequentemente teremos que $\langle a|a\rangle = 0$, ou seja, $(a - a^*)\langle a|a\rangle = 0$ só será nulo se os autovetores forem ortogonais [13]. Assim acabamos de provar um teorema muito importante que diz o seguinte:

Os autovalores de um operador hermitiano são reais e, os autovetores correspondentes a diferentes autovalores são ortogonais entre si.

O teorema que acabamos de provar garante que os autovalores são reais sempre que o operador for hermitiano [9]. Considerando que os autovetores são normalizados (se não forem é só normalizar) [13], expressa-se a relação de ortogonalidade da base discreta como

$$\langle a|a\rangle = \delta_{aa}. \quad (2.28)$$

sendo portanto a base de $\{|a\rangle\}$ o espaço de kets é inteiramente gerado pelos autoestados de A, estes autoestados devem, por construção, formar um conjunto completo de nosso espaço de kets [9].

2.3.2 Autovetores como kets de base

Um ponto importante do teorema anterior é que se todos os autovalores forem distintos entre si, isso significa que o espectro dos autovalores não é degenerado, conseqüentemente todos os autovalores são ortonormais. No caso em que num espectro de autovalores existe uma certa duplicidade, este espectro é degenerado. Portanto, a degenerência ocorre quando existe autovalores duplicado, porém autovetores distintos. tendo um conjunto de autovetores ortogonais e formam um conjunto completo. Neste caso, pode-se utilizá-los para expandir um ket arbitrário do espaços de kets nos autoestados do operador A. Então, pode-se tentar expandir o ket $|\alpha\rangle$ a partir dos autoestados do observável A [15], através da seguinte expressão:

$$|\alpha\rangle = \sum_a c_a |a\rangle. \quad (2.29)$$

para determinar o valor do coeficiente c_a , vamos multiplicar o bra $\langle a|$ do lado esquerdo da equação (2.29) e utilizando a relação ortonormalidade, temos

$$\langle a|\alpha\rangle = \langle a|\sum_a c_a |a\rangle = \sum_a c_a \langle a|a\rangle \implies \langle a|\alpha\rangle = \sum_a c_a \delta_{aa} = c_a. \quad (2.30)$$

Portanto, a equação (2.30) nos fornece os valores de coeficiente c_a na expansão do ket arbitrário $|\alpha\rangle$ na base $\{|a\rangle\}$:

$$c_a = \langle a|\alpha\rangle, \quad (2.31)$$

substituindo o resultado encontrado para os coeficientes de c_a na equação (2.29), obtemos

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \sum_a \langle a|\alpha\rangle |a\rangle \\ &= \sum_a \langle a|a\rangle |\alpha\rangle \\ &= \sum_a \langle a|a\rangle |\alpha\rangle. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Essa substituição fornece resultado um tanto surpreendente, uma vez que permite fazer uma analogia com expansão que ocorre no espaço euclidiano \mathbb{R}^3 com os vetores \mathbf{V} :

$$\mathbf{V} = \sum_{i=1}^3 \mathbf{e}_i v_i, \quad (2.33)$$

lembrando que pela ortogonalidade da base

$$v_i = \mathbf{e}_j \mathbf{V}_i, \quad (2.34)$$

substituindo o resultado da equação (2.34) na equação (2.33), temos

$$\mathbf{V} = \sum_{i=1}^3 \mathbf{e}_i (\mathbf{e}_j \mathbf{V}_i). \quad (2.35)$$

Note que da equação (2.32) dos dois lados temos $|\alpha\rangle$ significa que a combinação linear $\sum_a \langle a|a\rangle$ não altera o $|\alpha\rangle$. Em outras palavras ela é a definição do operador identidade, expressa da seguinte forma:

$$\sum_a \langle a|a\rangle = 1, \quad (2.36)$$

o operador identidade ao atuar sobre um ket $|b\rangle$ retorna o mesmo ket $|b\rangle$. A equação (2.36) é denominada de relação de completeza ou fechamento da base. Ela aparenta ser simples, porém é muito importante uma vez que podemos inseri-lá em qualquer lugar que julgarmos conveniente desde que os kets, bras ou operadores estejam multiplicados na ordem correta [9]. Por exemplo, $\langle \alpha|\alpha\rangle$, inserindo operador identidade entre bra $\langle \alpha|$ e o ket $|\alpha\rangle$ temos

$$\begin{aligned} \langle \alpha|\alpha\rangle &= \langle \alpha|(\sum_a |a\rangle\langle a|)|\alpha\rangle \\ &= \sum_a (\langle \alpha|a\rangle)(\langle a|\alpha\rangle) \\ &= \sum_a c_a^* c_a \\ &= \sum_a |c_a|^2 \\ &= 1. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Neste caso, se $|\alpha\rangle$ for normalizado, como consequência os coeficientes da expressão $|\alpha\rangle = \sum_a c_a |a\rangle$ devem satisfazer

$$\sum_a |c_a|^2 = \sum_a |\langle a|\alpha\rangle|^2 = 1. \quad (2.38)$$

Sendo $|a\rangle\langle a|$ um produto externo, ele deve ser um operador [9]. Convém deixá-lo agir em $|\alpha\rangle$:

$$(|a\rangle\langle a|) \cdot |\alpha\rangle = |a\rangle\langle a|\alpha\rangle = c_a |a\rangle. \quad (2.39)$$

A percepção de que o operador $|a\rangle\langle a|$ é um operador projetor na direção do ket da base $|a\rangle$, visto que ele seleciona a parte do ket $|\alpha\rangle$ que é paralela a $|a\rangle$. Ele será definida, então,

como

$$\Lambda = |a\rangle\langle a|. \quad (2.40)$$

Portanto a relação de completeza pode ser expresso da seguinte forma

$$\sum_a \Lambda_a = 1. \quad (2.41)$$

O quadrado do módulo dos coeficientes na expansão do ket $|\alpha\rangle$ na base $|a\rangle$ representa a probabilidade associada a cada autoestado $|a\rangle$ na expansão de $|\alpha\rangle$ [13].

2.3.3 Representação Matricial

Os operadores hermitianos podem ser representados por matrizes quadradas [15]. Dado que especificamos uma base é possível construir explicitamente a representação matricial para os operadores X, kets de base $|a\rangle$ e kets genéricos $|\alpha\rangle$ e seus correspondentes duais [13]. Para demonstrar como funciona, vamos aplicar operador identidade duas vezes. Suponha que X é um operador genérico

$$\begin{aligned} \mathbf{X} &= \mathbf{1}\mathbf{X}\mathbf{1} \\ &= \sum_{a'} \Lambda_{a'} \mathbf{X} \sum_{a''} \Lambda_{a''} \\ &= \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| \mathbf{X} \sum_{a''} |a''\rangle \langle a''| \\ &= \sum_{a'} \sum_{a''} |a'\rangle \langle a'| \mathbf{X} |a''\rangle \langle a''| \\ &= \sum_{a' a''} |a'\rangle \langle a'| \mathbf{X} |a''\rangle \langle a''|, \end{aligned} \quad (2.42)$$

onde o termo $\langle a'| \mathbf{X} |a''\rangle$ é um número e que pode ser entendido como matriz quadrada $N \times N \rightarrow N^2$ e N é a dimensionalidade do espaço de kets.

$$\langle a'| \mathbf{X} |a''\rangle, \quad (2.43)$$

sendo a' representa a linha e a'' representa a coluna, assim temos um elemento de matriz do operador X na a' -ésima linha a'' -ésima coluna. Então, podemos escrever a matriz X como

$$\mathbf{X} \doteq \begin{pmatrix} \langle a^1 | \mathbf{X} | a^1 \rangle & \langle a^1 | \mathbf{X} | a^2 \rangle & \cdots & \langle a^1 | \mathbf{X} | a^N \rangle \\ \langle a^2 | \mathbf{X} | a^1 \rangle & \langle a^2 | \mathbf{X} | a^2 \rangle & \cdots & \langle a^2 | \mathbf{X} | a^N \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle a^N | \mathbf{X} | a^1 \rangle & \langle a^N | \mathbf{X} | a^2 \rangle & \cdots & \langle a^N | \mathbf{X} | a^N \rangle \end{pmatrix}, \quad (2.44)$$

relembrando que notação matricial é

$$\mathbb{M}^\dagger = (\mathbb{M}^t)^*, (\mathbb{M}^\dagger)_{ij} = \mathbb{M}_{ij}^*. \quad (2.45)$$

Para obter uma matriz adjunta precisa de duas operações: primeira a transposta e a segunda complexo conjugado como ilustrada na equação (2.45). Para operador escrito em função da base a equação anterior transforma-se em

$$\langle a' | \mathbf{X} | a'' \rangle^* = \langle a'' | \mathbf{X}^\dagger | a' \rangle, \quad (2.46)$$

lembrando que para um operador hermitiano $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}$, então

$$\langle a' | \mathbf{A} | a'' \rangle^* = \langle a'' | \mathbf{A} | a' \rangle. \quad (2.47)$$

Pela construção feita do elemento de matriz de um dado operador genérico $Z = XY$ respeita a regra de multiplicação matricial [9]. A demonstração segue

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{a'a''} |a'\rangle \langle a' | Z | a'' \rangle \langle a'' | \\ &= \sum_{a'a''} |a'\rangle \langle a'' | \langle a' | Z | a'' \rangle \\ &= \sum_{a'a''} |a'\rangle \langle a'' | \langle a' | X \cdot Y | a'' \rangle \\ &= \sum_{a'a''} |a'\rangle \langle a'' | \langle a' | X \sum_{a'''} |a'''\rangle \langle a'' | Y | a'' \rangle \\ &= \sum_{a'a''a'''} |a'\rangle \langle a'' | \langle a' | X | a'''\rangle \langle a'' | Y | a'' \rangle, \end{aligned} \quad (2.48)$$

para o elemento de matriz $Z_{a'a''}$ do operador Z , temos

$$\langle a' | Z | a'' \rangle = \sum_{a'''} \langle a' | X | a'''\rangle \langle a'' | Y | a'' \rangle \quad (2.49)$$

Para chegarmos a equação (2.49), inserimos o operador identidade, escrito entre os operadores X e Y . Da mesma forma que ocorre com operadores, pode acontecer também com os vetores, por exemplo os kets ou bras.

Agora vamos verificar como é a relação entre kets

$$|\beta\rangle = Z|\alpha\rangle \quad (2.50)$$

fazendo uso de kets de base podemos representar (2.50). Os coeficientes da expansão de $|\beta\rangle$ podem ser obtidos multiplicando-o por $\langle a' |$ pela esquerda [9]:

$$\langle a' | \beta \rangle = \langle a' | Z | \alpha \rangle \quad (2.51)$$

inserindo a relação de completeza entre o Z e o ket $|\alpha\rangle$, temos

$$\langle a' | \beta \rangle = \sum_{a''} \langle a' | Z | a'' \rangle \langle a'' | \alpha \rangle \quad (2.52)$$

com isso passarmos a ter matriz $Z_{a'a''}$ basicamente temos o seguintes:

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | \alpha \rangle \\ \langle a^{(2)} | \alpha \rangle \\ \langle a^{(3)} | \alpha \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}, |\beta\rangle = \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | \beta \rangle \\ \langle a^{(2)} | \beta \rangle \\ \langle a^{(3)} | \beta \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (2.53)$$

Então, a representação matricial de $|\beta\rangle = Z|\alpha\rangle$ é

$$\begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | \beta \rangle \\ \langle a^{(2)} | \beta \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | Z | a^{(1)} \rangle & \langle a^{(1)} | Z | a^{(2)} \rangle & \dots \\ \langle a^{(2)} | Z | a^{(1)} \rangle & \langle a^{(2)} | Z | a^{(2)} \rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | \alpha \rangle \\ \langle a^{(2)} | \alpha \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (2.54)$$

Assim podemos observar que é possível transformar todas as relações dos kets e operadores como produto matricial.

Da mesma forma que aconteceu com os kets também podemos fazer com os bras

$$\langle \beta | = \langle \alpha | Z, \quad (2.55)$$

multiplicando a equação anterior por $|a'\rangle$ e inserindo a relação de completeza, vem

$$\langle \beta | a' \rangle = \sum_{a''} \langle \alpha | a'' \rangle \langle a'' | Z | a' \rangle. \quad (2.56)$$

Logo, um bra é representado por uma matriz linha da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\langle\beta| &= (\langle\beta|a^{(1)}\rangle, \langle\beta|a^{(2)}\rangle, \langle\beta|a^{(3)}\rangle, \dots) \\ &= (\langle a^{(1)}|\beta\rangle^*, \langle a^{(2)}|\beta\rangle^*, \langle a^{(3)}|\beta\rangle^*, \dots).\end{aligned}\quad (2.57)$$

Através das discussões feitas acima temos a condição de verificar como representar o produto interno $\langle\gamma|\alpha\rangle$ na forma matricial, em que $\langle\gamma|$ representa uma matriz linha e, $|\alpha\rangle$ representa uma matriz coluna

$$\langle\gamma|\alpha\rangle = \sum_{a'} \langle\gamma|a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle \quad (2.58)$$

$$\langle\gamma|\alpha\rangle = (\langle a^{(1)}|\gamma\rangle^*, \langle a^{(2)}|\gamma\rangle^*, \dots) \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\alpha\rangle \\ \langle a^{(2)}|\alpha\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (2.59)$$

A aparição do complexo conjugado na equação (2.59) se deve através da multiplicação $\langle\alpha|$ em representação da matriz linha pela $|\gamma\rangle$ que representa a matriz coluna. Por fim, vamos verificar como é a representação matricial do produto externo $|\gamma\rangle\langle\alpha|$

$$|\gamma\rangle\langle\alpha| \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\gamma\rangle\langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* & \langle a^{(1)}|\gamma\rangle\langle a^{(2)}|\alpha\rangle^* & \dots \\ \langle a^{(2)}|\gamma\rangle\langle a^{(1)}|\alpha\rangle^* & \langle a^{(2)}|\gamma\rangle\langle a^{(2)}|\alpha\rangle^* & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (2.60)$$

A representação matricial de um operador A na sua própria base. Para isso suponha que

$$A = 1A1 = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|A\sum_{a''} |a''\rangle\langle a''|, \quad (2.61)$$

$$A = \sum_{a'a''} |a'\rangle\langle a'|A|a''\rangle\langle a''|. \quad (2.62)$$

Desta forma fica clara que a matriz quadrada $\langle a''|A|a'\rangle$ é diagonal, expressa da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} a^1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a^2 & \dots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a^N \end{pmatrix} \quad (2.63)$$

Então

$$\begin{aligned} A &= \sum_{a' a''} a'' |a'\rangle \langle a'| \delta_{a' a''} \\ &= \sum_{a'} a' |a'\rangle \langle a'|, \end{aligned} \quad (2.64)$$

lembrando que $|a'\rangle \langle a'| = \Lambda_{a'}$ \rightarrow operador projeção. logo,

$$A = \sum_{a'} a' \Lambda_{a'}. \quad (2.65)$$

Na próxima seção discutiremos sobre as medidas.

2.4 Medidas, Observáveis e Relação de Incerteza

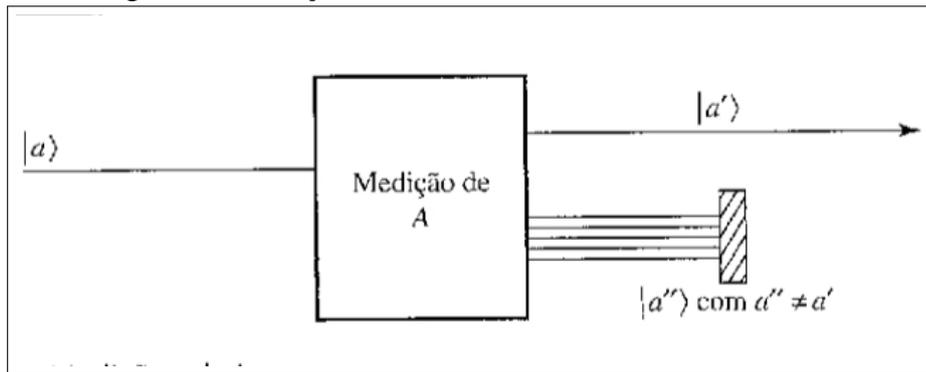
A estrutura da MQ pode ser feita da seguinte forma. Um sistema fechado é descrito por um estado que evolui no tempo de maneira determinista (conforme a equação de Schrödinger). Diferentemente da Mecânica Clássica, o estado em questão fornece apenas a probabilidade de obterem diferentes resultados de uma certa medição [16]. Na interpretação probabilística, quase que é impossível atribuir valores exatos em uma medida. No entanto, ela permite prever a probabilidade de encontrar certos resultados em uma medida desde já que conhece o estado associado a grandeza em questão [17]. Os elementos principais para se realizar medidas em MQ consistem no objeto de estudo a ser medido, num aparato e procedimento. A discussão que será feita a seguir vai respeitar a álgebra linear, a teoria da probabilidade e fornecerá argumentos que permitam entender o colapso no processo de medida.

2.4.1 Medidas

Com as discussões realizadas nas seções anteriores, temos as ferramentas matemáticas que nos possibilita discutir o processo de medida na MQ. Porém, não podemos avançar sem trazer as palavras do Dirac a respeito do processo de medir. Nas suas palavras ele afirma que: uma medição sempre faz o sistema pular para um autoestado da variável dinâmica sendo medido [9]. Tudo que se conhece antes de uma medida ser realizada, sobre um sistema preparado num estado $|\alpha\rangle$, se resume à informação sobre um conjunto de probabilidades de resultados possíveis de serem medidos, em termos probabilísticos, da variável dinâmica considerada [15].

Suponha que o observável a ser medido seja A . E que antes de realizar a medida o sistema se encontra no estado $|\alpha\rangle$ que é possível de expandir na base $|a'\rangle$ dos autoestados deste

Figura 5 – Medição seletiva



Fonte: Sakurai: Mecânica Quântica Moderna

operador:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle. \quad (2.66)$$

No momento em que a medida é feita, o sistema pula para um dos possíveis autoestados de $|a'\rangle$ do operador A , como representado a seguir:

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{medição de } A} |a'\rangle. \quad (2.67)$$

Vamos voltar ao experimento de SG para tentar entender o que foi feito. Suponha que tem um átomo que possui orientação arbitrária de spin assumindo ou $|S_z+\rangle$ ou $|S_z-\rangle$ depois de passarem pelo aparato de $SG\hat{z}$, ou seja, o resultado de medida de um processo resulta em um dos autovalores do observável que esta sendo medido. O ato de medir usualmente altera o estado [9]. Agora digamos que o sistema já se encontra no próprio autoestado do observável físico que está sendo medido. Neste caso, temos a certeza absoluta que o resultado de medida será

$$|a'\rangle \xrightarrow{\text{medição de } A} |a'\rangle \quad (2.68)$$

Considere o ket $|\alpha\rangle$ representando o estado de um sistema físico no momento antes de se realizar a medida, não se sabe de antemão em qual dos vários $|a'\rangle$, o sistema escolherá como resultado da medida [9]. Entretanto, pode-se postular que, ao preparar o sistema no estado $|\alpha\rangle$, que possui toda informação possível de se obter do sistema, a probabilidade de ele assumir um dos possíveis valores de $|a'\rangle$ é dado por

$$\text{Probabilidade de } a' = |\langle a'|\alpha\rangle|^2 \quad (2.69)$$

A Interpretação probabilística (2.69) para o quadrado do produto interno $|\langle a'|\alpha\rangle|^2$ é um dos postulados fundamentais da mecânica quântica, no entanto, não pode ser provado [9].

Considere que o estado de um sistema físico seja o próprio ket $|a'\rangle$ antes mesmo de se realizar a medida; de acordo com a equação (2.67), a probabilidade de se obter a' após a medida é igual a 1, de forma resumida temos,

se $|\alpha\rangle = |a'\rangle$, então $|\langle a'|\alpha\rangle|^2 = |c_{a'}|^2 = 1$ significa que o sistema sempre se encontrará no mesmo estado.

Agora suponha que o sistema esteja em $|a'\rangle$ antes da medida e estamos interessado que ele passe para um outro autoestado, digamos $|a''\rangle$ em que $a'' \neq a'$, então, segundo a (2.67) a probabilidade zero devida a ortogonalidade entre $|a'\rangle$ e $|a''\rangle$.

2.4.2 O Valor Esperado de um Observável A ou Valor Médio

O valor esperado do operador A, é representado assim $\langle A \rangle$, e a definição matemática do valor esperado de um operador A em relação ao estado $|\alpha\rangle$ é dado por

$$\langle A \rangle \equiv \langle \alpha | A | \alpha \rangle, \quad (2.70)$$

reescrevendo, temos

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \alpha | A | \alpha \rangle \\ &= \langle \alpha | \mathbf{1} A \mathbf{1} | \alpha \rangle \\ &= \sum_{a'} \sum_{a''} \langle \alpha | a' \rangle \langle a' | A | a'' \rangle \langle a'' | \alpha \rangle \\ &= \sum_{a' a''} c_{a'}^* c_{a''} \langle a' | a'' | a'' \rangle \\ &= \sum_{a' a''} c_{a'}^* c_{a''} \delta_{a' a''} \\ &= \sum_{a'} |c_{a'}|^2 a', \end{aligned} \quad (2.71)$$

vale ressaltar que o valor esperado não é o valor que se obtém na medida, no entanto ele é a média das medidas, ou seja, o valor esperado é igual ao valor médio e $|c_{a'}|^2$ é a probabilidade do operador A assumir o autovalor a' numa medida.

Cuidado : o valor esperado de um operador A, calculada assim

$$\langle A \rangle = \langle \alpha | A | \alpha \rangle = \sum_{a'} |c_{a'}|^2 a', \quad (2.72)$$

é diferente do autovalor:

$$\langle A \rangle \doteq \langle a' | A | a' \rangle = a' \quad (2.73)$$

onde

$$\langle a'|a' \rangle = 1. \quad (2.74)$$

A noção de medida seletiva ou filtragem ajuda no esclarecimento do que significa a medida em MQ e é um caminho útil para apresentar o postulado da projeção [15]. A filtragem é a separação de um único autovalor a' do espectro dos autovalores $\{a'\}$ do operador A [13]. O que foi descrito no experimento SG anteriormente é basicamente a medida seletiva, onde era selecionado uma das componentes de feixes e bloqueavam o outro. O presente procedimento de medida seletiva ou filtragem pode ser expressa de forma matemática, utilizando o projetor. Em que o projetor $\Lambda_{a'}$ seleciona do estado físico $|\alpha\rangle$ apenas a componente na direção $|a'\rangle$, como ilustrado na fig

$$\Lambda_{a'}|\alpha\rangle = |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle \quad (2.75)$$

2.4.3 Observáveis

o que se mede são denominados de observáveis [15]. As propriedades que formam um observável têm duas características importantes: 1) Podem excluir-se mutuamente ou, 2) Constituem um conjunto completo, incluem entre si todos os possíveis resultados da medição do observável [18]. Existe dois tipos de observáveis na MQ Observáveis compatíveis e incompatíveis que têm uma relação importante que discutiremos nessa seção.

Dois observáveis A e B são ditos compatíveis se os operadores a ele correspondentes comutam

$$[A, B] = 0. \quad (2.76)$$

Como os observáveis A e B são compatíveis. Agora considere que os autovalores de A é que formam os espaços dos kets. o que pode também ser formado pelos autovalores de B. Nesse ponto, queremos saber como é que os autovetores de A e de B se relação quando os seus observáveis comutam ou em outras palavras forem compatíveis. Para mostrar essa relação primeiro vamos enunciar um teorema importante:

Teorema: Considere que A e B como observáveis físicos compatíveis, e os autovalores de A sejam não degenerados (diferentes). Então a representação matricial do operador B, cujo elementos de matriz são $\langle a''|B|a' \rangle$ é diagonal (recorde-se de que os elementos de matriz A já são diagonais se $\{|a'\rangle\}$ forem usados como kets de base).

Prova

Seja $A|a'\rangle = a'|a'\rangle$, então o seu correspondente dual é $\langle a'|A^\dagger = \langle a'|a'^*$. Pois como A é observável hermitiano, então $A^\dagger = A$ logo autovalor de A é real. Então usando a definição de observáveis compatíveis, temos

$$\langle a''|[A,B]|a'\rangle = 0 \quad (2.77)$$

$$\langle a''|A,B - B,A|a'\rangle = 0 \quad (2.78)$$

$$\langle a''|a''B - Ba'|a'\rangle = 0 \quad (2.79)$$

$$(a'' - a')\langle a''|B|a'\rangle = 0. \quad (2.80)$$

Desta forma $\langle a''|B|a'\rangle = \delta_{a'a''}\langle a'|B|a'\rangle$ uma vez que o operador A não tem autovalores duplicados, ou seja, $a'' \neq a'$. Agora pegando a representação do operador B reescrevendo usando a representação matricial do A e operador identidade, temos

$$B = \sum_{a'} \sum_{a''} |a'\rangle \langle a'|B|a''\rangle \langle a''|. \quad (2.81)$$

considere que o operador B esta atuando em $|a'''\rangle$

$$B|a'''\rangle = \sum_{a'} \sum_{a''} |a'\rangle \langle a'|B|a''\rangle \langle a''|a'''\rangle \quad (2.82)$$

$$= \sum_{a'} \sum_{a''} |a'\rangle \langle a'|B|a''\rangle \delta_{a''a'''}, \quad (2.83)$$

então

$$B|a'''\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|B|a'''\rangle. \quad (2.84)$$

Porém como $\langle a''|B|a'\rangle = \delta_{a'a''}\langle a'|B|a'\rangle$, então

$$B|a'''\rangle = |a'\rangle \delta_{a'a'''} \langle a'|B|a'\rangle, \quad (2.85)$$

logo

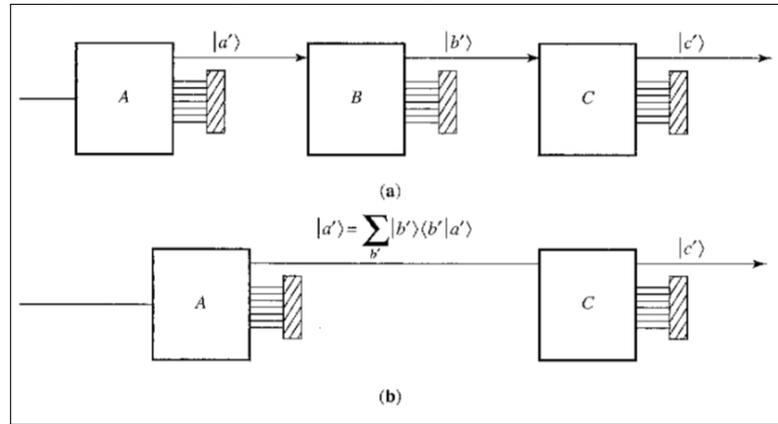
$$B|a'''\rangle = |a'''\rangle \langle a'''|B|a'''\rangle. \quad (2.86)$$

Olhando atentamente para equação (2.86) ela é nada mais que uma relação de autovalor e autovetor. Portanto, podemos afirmar que $B|a'''\rangle = b'''|a'''\rangle$

$$b''' = \langle a'''|B|a'''\rangle, \quad (2.87)$$

sendo que $|a'\rangle$ um autovetor simultâneo de A e B. Se usássemos o operador B no início teríamos o ket $|b'\rangle$ como autovetor simultâneo, o que queremos dizer é que podemos usar $|a', b'\rangle$ para caracterizar o autovetor simultâneo.

Figura 6 – Medição seletiva sequenciais



Fonte: Sakurai: Mecânica Quântica Moderna

Podemos discutir agora sobre observáveis incompatíveis. Os observáveis A e B são definidos como incompatíveis quando os operadores correspondentes a eles não comutam

$$[A, B] \neq 0. \quad (2.88)$$

É importante realçar que operadores incompatíveis não possuem um conjunto completo de autovetores simultâneo[9]. Para ilustrar o significado entre dois observáveis A e B, considere a sequencia de medição seletiva na figura 6. Na situação da figura, o filtro A deixa passar apenas um $|a'\rangle$ e bloqueia todos os outros, o B deixa passar apenas $|b'\rangle$ e o terceiro filtro C faz o mesmo para um $|c'\rangle$, bloqueia o resto. Então, qual é a probabilidade de se obter $|c'\rangle$ depois que o feixe passe por pelo primeiro filtro é normalizado em 1 [9].

$$Prob^{a' \rightarrow b'} = |\langle b'|a'\rangle|^2, \quad (2.89)$$

$$Prob^{b' \rightarrow c'} = |\langle c'|b'\rangle|^2. \quad (2.90)$$

Lembrando que as probabilidades se multiplicam, temos

$$|\langle c'|b'\rangle|^2 |\langle b'|a'\rangle|^2. \quad (2.91)$$

Estamos interessados em obter $|c'\rangle$ a partir de $|a'\rangle$, ou seja, queremos saber a probabilidade de obter o $|c'\rangle$ sem passar pelo $|b'\rangle$, para isso, vamos ter que fazer todas as medidas dos possíveis

valores e somar tudo, assim

$$\sum_{b'} |\langle c'|b' \rangle|^2 |\langle b'|a' \rangle|^2 = \sum_{b'} \langle c'|b' \rangle \langle b'|a' \rangle \langle a'|b' \rangle \langle b'|c' \rangle. \quad (2.92)$$

Agora suponha que a montagem ficou sem o filtro B como mostra a figura 6. Neste caso, a probabilidade é $|\langle c'|a' \rangle|^2$, reescrevendo temos

$$|\langle c'|a' \rangle|^2 = \left| \sum_{b'} \langle c'|b' \rangle \langle b'|a' \rangle \right|^2 = \sum_{b'} \sum_{b''} \langle c'|b' \rangle \langle b'|a' \rangle \langle a'|b'' \rangle \langle b''|c' \rangle. \quad (2.93)$$

As duas ultimas equações são diferentes. Este resultado é surpreendente, pois em ambos os casos o feixe puro $|a' \rangle$ que sai do filtro (A) pode ser entendido como sendo formado dos autovetores de B

$$|a' \rangle = \sum_{b'} |b' \rangle \langle b'|a' \rangle. \quad (2.94)$$

2.4.4 Relações de Incerteza

A incompatibilidade de certos observáveis na MQ é uma das suas características mais notáveis podendo ser revelada e formalizada através da relação de incerteza [19]. Ela traz a tona uma questão muito importante, colocada pela limitação de constante Planck, que esta na essência da complementaridade [15]. Na mecânica clássica, as posições e os momentos das partículas podem ser determinados sem qualquer limitações fundamentais [20]. Diferentemente da mecânica clássica, na MQ a posição e momento de uma partícula não podem ser determinados experimentalmente ao mesmo tempo com precisão ilimitada [21]. Esse é o famoso principio da incerteza de Heisenberg [17]. provado no início do formalismo quântico e que está presente tanto no ensino quanto na pesquisa em MQ [19]. Em seguida vamos discutir a relação de incerteza no formato matemático.

Considere A um operador hermitiano associado a dada variável dinâmica. Definimos um operador

$$\Delta A = A - \langle A \rangle, \quad (2.95)$$

onde ΔA é definido como o operador desvio do valor esperado de um observável físico A. O valor esperado de $(\Delta A)^2$ é conhecido como **dispersão**. Logo,

$$(\Delta A)^2 = (A - \langle A \rangle)(A - \langle A \rangle) = (A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2), \quad (2.96)$$

para $\langle (\Delta A)^2 \rangle$, temos que

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle 2A\langle A \rangle \rangle + \langle \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle^2 + \langle A \rangle^2. \quad (2.97)$$

Portanto,

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2, \quad (2.98)$$

A equação 2.98 é denominado de variância ou desvio quadrático médio, a mesma equação as vezes é usada como a definição alternativa de **dispersão**. A dispersão mede a falta de nitidez da medida de um observável em dado estado [13]. Obviamente que a dispersão na equação 2.98 será nula se estado de que se trata for um autoestado de A, por exemplo

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle'_{|a\rangle} = \langle a'|A^2|a'\rangle - \langle a'|A|a'\rangle^2 = (a^{2'} - a^{2'})\langle a'|a'\rangle = 0, \quad (2.99)$$

visto que $a^{2'} = a^{2'}$.

Vamos abordar a relação de incerteza com o objetivo de demonstrar a validade dessa relação. Sejam A e B dois observáveis. Então, para qualquer estado, vale a seguinte desigualdade [17]

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2 \quad (2.100)$$

Para provar o resultado anterior será usado no processo, primeiro a desigualdade de Schwarz, segundo o valor esperado de operador hermitiano e por fim o valor esperado do operador anti-hermitiano.

A desigualdade de Schwarz estabelece que dado dois vetores não nulo $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ no espaço de Hilbert [19], temos que

$$\langle \alpha|\alpha\rangle \langle \beta|\beta\rangle \geq |\langle \alpha|\beta\rangle|^2, \quad (2.101)$$

a desigualdade acima é semelhante a desigualdade triangular no formato vetorial

$$|a|^2 |b|^2 \geq |a \cdot b|^2, \quad (2.102)$$

lembrando que

$$|a||b| = ab \geq |a \cdot b| = ab \cos \theta, \quad (2.103)$$

sendo que a igualdade $\theta = 0$ é válida [13].

Demonstração: para qualquer ket genérico $|\gamma\rangle$ temos que $\langle \gamma|\gamma\rangle \geq 0$. Então,

$$|\gamma\rangle = |\alpha\rangle + c|\beta\rangle, \quad (2.104)$$

$$\langle \gamma|\gamma\rangle \geq 0 \implies (\langle \alpha| + c^* \langle \beta|) \cdot (|\alpha\rangle + c|\beta\rangle) \geq 0. \quad (2.105)$$

Fazendo a multiplicação distributiva, temos

$$\langle \alpha | \alpha \rangle + c \langle \beta | \beta \rangle + c^* \langle \beta | \alpha \rangle + |c|^2 \langle \beta | \beta \rangle \geq 0, \quad (2.106)$$

tendo desenvolvido a equação acima, agora vamos escolher um dado c que nos dá $\langle \beta | \gamma \rangle = 0$ suponha que $\langle \beta | \gamma \rangle = 0$, então

$$\langle \beta | \alpha \rangle + c \langle \beta | \beta \rangle = 0 \quad (2.107)$$

$$c = -\frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} \implies c^* = -\frac{\langle \alpha | \beta \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle}. \quad (2.108)$$

Agora substituindo na equação 2.134 os valores de c , temos

$$\langle \alpha | \alpha \rangle - \frac{\langle \beta | \alpha \rangle \langle \alpha | \beta \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} - \frac{\langle \alpha | \beta \rangle \langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} + \frac{\langle \alpha | \beta \rangle \langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle^2} \langle \beta | \beta \rangle \geq 0, \quad (2.109)$$

$$\langle \alpha | \alpha \rangle - \frac{|\langle \alpha | \beta \rangle|^2}{\langle \beta | \beta \rangle} \geq 0 \quad (2.110)$$

desta forma

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2, \quad (2.111)$$

Assim acabamos de demonstrar a desigualdade de Schwarz.

Teorema: O valor esperado de um operador hermitiano é um número real.

Demonstração: Considere A um operador hermitiano $A = A^\dagger$ e que $\{|a'\rangle\}$ seja base ortonormal e completa de autoestados do operador A . Pois,

$$\langle a' | a'' \rangle = \delta_{a' a''} \quad (2.112)$$

$$\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| = 1 \quad (2.113)$$

e

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle, \quad (2.114)$$

sendo que o seu correspondente dual

$$\langle a'' | A = \langle a'' | a''. \quad (2.115)$$

Daí obtem-se das duas ultimas equação

$$\langle a'' | A | a' \rangle = a' \langle a'' | a' \rangle \quad (2.116)$$

$$\langle a''|A|a'\rangle = a''^* \langle a''|a'\rangle, \quad (2.117)$$

subtraindo, temos

$$(a''^* - a') \langle a''|a'\rangle = 0 \implies \begin{cases} \text{Para } a' \neq a'', & \langle a''|a'\rangle = 0, \text{ os autovetores são ortogonais} \\ \text{Para } a' = a'', & a''^* = a'' \text{ os autovalores são reais[13]} \end{cases} \quad (2.118)$$

Teorema: O valor esperado de um operador anti-hermitiano, definido por $B = -B^\dagger$ é imaginário puro.

Demonstração: Vimos que

$$B|b'\rangle = b'|b'\rangle \iff \langle b'|B^\dagger = \langle b''|b''. \quad (2.119)$$

Dá primeira e segunda equação obtem-se

$$\langle b''|B|b'\rangle = b' \langle b''|b'\rangle \quad (2.120)$$

$$\langle b''|B|b'\rangle = -b'' \langle b''|b'\rangle. \quad (2.121)$$

Fazendo a subtração, temos

$$(b''^* + a') \langle b''|b'\rangle = 0 \implies \begin{cases} \text{Para } b' \neq b'', & \langle b''|b'\rangle = 0, \text{ os autovetores são ortogonais} \\ \text{Para } b' = b'', & b''^* = -b' \text{ os autovalores são imaginário puros[13]} \end{cases} \quad (2.122)$$

Assim demonstramos que os autovalores de um operador anti-hermitiano são números imaginário puros.

Tendo apresentado as demonstrações dos três (3) teoremas que vamos articular para provar a relação de incerteza. Estamos em condições de utilizá-los para mostrar a desigualdade da relação de incerteza. Então, considere $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ estados de um "ket" resultado de da atuação dos operadores de incerteza ΔA e ΔB

$$\Delta A|\gamma\rangle = |\alpha\rangle \iff \langle \gamma|(\Delta A)^\dagger, \quad (2.123)$$

$$\Delta B|\gamma\rangle = |\beta\rangle \iff \langle \gamma|(\Delta B)^\dagger = |\beta\rangle, \quad (2.124)$$

valendo a desigualdade $\langle \alpha|\alpha\rangle \langle \beta|\beta\rangle \geq |\langle \alpha|\beta\rangle|^2$, então

$$\langle \gamma|(\Delta A)^\dagger(\Delta A)|\gamma\rangle \langle \gamma|(\Delta B)^\dagger(\Delta B)|\gamma\rangle \geq |\langle \gamma|(\Delta A)^\dagger(\Delta B)|\gamma\rangle|^2. \quad (2.125)$$

Sendo que A e B são hermitiano , então $\Delta A = (\Delta A)^\dagger$ o mesmo vale para B, logo

$$\langle \gamma | (\Delta A)^2 | \gamma \rangle \langle \gamma | (\Delta B)^2 | \gamma \rangle \geq |\langle \gamma | \Delta A \Delta B | \gamma \rangle|^2, \quad (2.126)$$

reorganizando, temos

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq |\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2. \quad (2.127)$$

Podemos ver que o lado esquerdo da equação 2.127 é igual com o lado esquerdo da equação 2.100. Agora vamos trabalhar o lado direito da equação 2.127 para encontrar a correlação com os comutadores. Então, Fazendo sistema de equação entre comutador e anti-comutador de ΔA e ΔB , temos

$$\Delta A \Delta B = \frac{1}{2}([\Delta A, \Delta B] + [\Delta A, \Delta B]), \quad (2.128)$$

lembrando que o comutador de $[\Delta A, \Delta B] = [A, B]$ é na verdade anti-comutador

$$[\Delta A, \Delta B]^\dagger = [A, B]^\dagger = (AB)^\dagger - (BA)^\dagger. \quad (2.129)$$

Se A e B são hermitiano, então

$$[A, B]^\dagger = BA - AB = -[A, B], \quad (2.130)$$

assim,

$$[\Delta A, \Delta B]^\dagger = -[\Delta A, \Delta B]. \quad (2.131)$$

No entanto, o anti-comutador $\Delta A, \Delta B$ é claramente hermitiano, de maneira que

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle [\Delta A, \Delta B] \rangle \equiv i\lambda_1 \implies \text{é um operador anti-hermitiano com autovalores imaginários puros} \\ \langle \{\Delta A, \Delta B\} \rangle \equiv \lambda_2 \implies \text{é um operador hermitiano com autovalores reais} \end{array} \right. \quad (2.132)$$

Sendo que λ pertencendo ao real. Portanto, se

$$\Delta A, \Delta B = \frac{1}{2}([\Delta A, \Delta B] + \{\Delta A, \Delta B\}), \quad (2.133)$$

logo,

$$\langle \Delta A \Delta B \rangle = \frac{1}{2}(\langle [\Delta A, \Delta B] \rangle + \langle \{\Delta A, \Delta B\} \rangle) = \frac{1}{2}(i\lambda_1 + \lambda_2). \quad (2.134)$$

Como tínhamos

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \cdot \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq |\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2, \quad (2.135)$$

daí vem que

$$|\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2 = \langle \Delta A \Delta B \rangle^* \langle \Delta A \Delta B \rangle = \frac{1}{2}(-i\lambda_1 + \lambda_2)(i\lambda_1 + \lambda_2) \frac{1}{2} = \frac{1}{4}(\lambda_1^2 + \lambda_2^2). \quad (2.136)$$

Portanto

$$|\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2 = \frac{1}{4}(|\langle [A, B] \rangle|^2 + |\langle \{\Delta A, \Delta B\} \rangle|^2). \quad (2.137)$$

A equação (2.137) nos mostra a impossibilidade de se determinar com exatidão, ou seja, não podemos medir o operador A e B simultaneamente, no caso em que esses operadores são incompatíveis. Mas se forem compatíveis é possível medir simultaneamente os operadores A e B com exatidão.

2.5 Mudança de Base

Considere que A e B sejam dois observáveis incompatíveis. podemos representar o espaço de kets em duas bases possíveis, usando a base $\{|a'\rangle\}$ dos autovetores do operador A ou a base $\{|b'\rangle\}$ que são autovetores. Pois, esses dois conjuntos diferentes de kets geram o mesmo espaço de kets. Uma vez que a escolha da base é indiferente, nos preocupa saber como é que se relacionam os operadores, autovetores e autovalores. Descobrir essa relação é equivalente a fazer a mudança de base, a base na qual os autovetores são expandido em termos da $\{|a'\rangle\}$ é denominado de representação de A ou representação diagonal de A [9].

Então, construir um operador de transformação que relacione as duas bases, é a nossa tarefa. Para isso, considere que $[A, B] \neq 0$ e que $\{|a'\rangle\}$ é a representação completa e ortonormal de operador A e $\{|b'\rangle\}$ é a representação completa e também ortonormal do operador B. Tomando $\{|a'\rangle\}$ como a base antiga e $\{|b'\rangle\}$ como base nova. Então como teorema,

Teorema: Dado dois conjuntos de kets de bases $\{|a'\rangle\}$ e $\{|b'\rangle\}$, ambos satisfazendo as condições de ortonormalidade e completude, existe um operador unitário val que

$$|b^{(1)}\rangle = U|a^{(1)}\rangle, |b^{(2)}\rangle = U|a^{(2)}\rangle, \dots, |b^{(N)}\rangle = U|a^{(N)}\rangle. \quad (2.138)$$

Um operador denominado de operador unitário satisfaz as condições

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1. \quad (2.139)$$

Demonstração: Sabemos que a equação de autovetor e autovalor dos operadores A e B são:

$$\begin{cases} A|a'\rangle = a'|a'\rangle \\ B|b'\rangle = b'|b'\rangle \end{cases}$$

Expandindo um ket qualquer $|\alpha\rangle$ temos como combinação linear

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |\alpha\rangle \text{ ou } |\alpha\rangle = \sum_{b'} c_{b'} |b'\rangle, \quad (2.140)$$

então queremos que

$$\hat{U}|a^{(k)}\rangle = |b^{(k)}\rangle, \quad (2.141)$$

supondo que

$$|\alpha\rangle = \sum_{a^{(k)}} c_{a^{(k)}} |a^{(k)}\rangle. \quad (2.142)$$

Usando a ortonormalidade da base, temos

$$|\alpha\rangle = \sum_{a^{(k)}} c_{a^{(k)}} |a^{(k)}\rangle = \sum_k |a^{(k)}\rangle \langle a^{(k)}|\alpha\rangle, \quad (2.143)$$

atuando \hat{U} do lado direito do ket $|\alpha\rangle$, vem

$$\hat{U}|\alpha\rangle = \sum_k \hat{U}|a^{(k)}\rangle \langle a^{(k)}|\alpha\rangle. \quad (2.144)$$

Como $\hat{U}|a^{(k)}\rangle = |b^{(k)}\rangle$, então

$$\hat{U}|\alpha\rangle = \sum_k |b^{(k)}\rangle \langle a^{(k)}|\alpha\rangle \implies \hat{U} = \sum_k |b^{(k)}\rangle \langle a^{(k)}|. \quad (2.145)$$

O adjunto hermitiano da equação anterior é $\hat{U}^\dagger = \sum_k |a^{(k)}\rangle \langle b^{(k)}|$ Se

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \sum_l |b^{(l)}\rangle \langle a^{(l)}| \sum_k |b^{(k)}\rangle \langle a^{(k)}| = \sum_{k,l} |a^{(l)}\rangle \underbrace{\langle b^{(l)}|b^{(k)}\rangle}_{\delta_{l,k}} \langle a^{(k)}|, \quad (2.146)$$

então,

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \sum_k |a^{(k)}\rangle \langle a^{(k)}| = 1. \quad (2.147)$$

Como queríamos demonstrar.

2.5.1 Matriz de transformação

Nesta seção o nosso foco é a representação matricial do operador U na base $\{|a'\rangle$ a base antiga. Sendo,

$$U = \sum_k |b^{(k)}\rangle \langle a^{(k)}| \implies \langle a^{(K)}|U|a^{(l)}\rangle = \langle a^{(k)}|b^{(l)}\rangle, \quad (2.148)$$

para termos a igualdade anterior basta fazer

$$\langle a^{(l)}| \sum_k |b^{(k)}\rangle \underbrace{\langle a^{(k)}|a^{(l)}\rangle}_{\delta_{k,l}} = \langle a^{(k)}|b^{(l)}\rangle \quad (2.149)$$

ou seja,

$$U_{kl} = \langle a^{(k)}|b^{(l)}\rangle. \quad (2.150)$$

Observando a equação 2.150 fica claro que para obter elementos de matriz do operador U basta fazer a construção de produtos internos entre os bras e kets da base antiga e nova respectivamente. Agora dado um ket qualquer $|\alpha\rangle$ cujos coeficientes $\langle a'|a\rangle$ de sua expansão em termos de vetores da base antiga são conhecidos

$$|\alpha\rangle = \sum_k |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle \quad (2.151)$$

estamos interessados em representar matricialmente $\langle b'|a\rangle$ para evitar equívocos vamos substituir a' por $a^{(l)}$, então

$$\langle b^{(k)}|\alpha\rangle = \langle b^{(k)}|\sum_l |a^{(l)}\rangle \langle a^{(l)}|\alpha\rangle = \sum_l \langle b^{(k)}|a^{(l)}\rangle \langle a^{(l)}|\alpha\rangle \quad (2.152)$$

lembrando que $U|a^{(k)}\rangle = |b^{(k)}\rangle$ e seu correspondente dual é $\langle b^{(k)}| = \langle a^{(k)}|U^\dagger$, logo

$$\langle b^{(k)}|\alpha\rangle = \sum_l \langle a^{(k)}|U^\dagger|a^{(l)}\rangle \langle a^{(l)}|\alpha\rangle. \quad (2.153)$$

Com isso, concluímos que a matriz coluna para $|\alpha\rangle$ na base nova, é facilmente obtido se multiplicarmos a matriz quadrada U^\dagger à matriz coluna na base antiga, assim

$$(nova) = (U^\dagger)(antiga). \quad (2.154)$$

Agora vamos fazer transformação da base para operador. Considere \hat{X} um operador qualquer escrito na base antiga da seguinte forma:

$$X \implies \langle a^{(k)}|X|a^{(l)}\rangle, \quad (2.155)$$

e na base antiga

$$X \implies \langle b^{(k)} | X | b^{(l)} \rangle \quad (2.156)$$

para fazer a transformação da base vamos inserir duas vezes a identidade, assim

$$\begin{aligned} \langle b^{(k)} | X | b^{(l)} \rangle &= \langle b^{(k)} | \sum_m | a^{(m)} \rangle \langle a^{(m)} | X \sum_n | a^{(n)} \rangle \langle a^{(n)} | b^{(l)} \rangle \\ &= \sum_{m,n} \langle b^{(k)} | a^{(m)} \rangle \langle a^{(m)} | X | a^{(n)} \rangle \langle a^{(n)} | b^{(l)} \rangle. \end{aligned} \quad (2.157)$$

Como $\langle b^{(k)} | = \langle a^{(k)} | U^\dagger$ e $| b^{(l)} \rangle = U | a^{(l)} \rangle$, então temos

$$\langle b^{(k)} | X | b^{(l)} \rangle = \sum_{m,n} \langle a^{(k)} | U^\dagger | a^{(m)} \rangle \langle a^{(m)} | X | a^{(n)} \rangle \langle a^{(n)} | U | a^{(l)} \rangle. \quad (2.158)$$

Neste caso, o que temos na equação (2.158) é uma transformação de similaridade, ou seja

$$X' = U^\dagger X U. \quad (2.159)$$

A soma diagonal de todos os elementos de um operador X é definido como o **traço**, a expressão matematicamente é dada por

$$tr(X) = \sum_{a'} \langle a' | X | a' \rangle. \quad (2.160)$$

contudo definimos traço usando uma certa base específico, mas o $tr(X)$ é independente da representação, como segue a seguir:

$$tr(X) = \sum_{a'} \langle a' | X | a' \rangle \quad (2.161)$$

inserindo a identidade antes e depois do X na equação anterior, vem

$$\begin{aligned} \sum_{a'} \langle a' | X | a' \rangle &= \sum_{a'} \sum_{b'} \sum_{b''} \langle a' | b' \rangle \langle b' | X | b'' \rangle \langle b'' | a' \rangle \\ &= \sum_{b' b''} \langle b' | X | b'' \rangle \langle b'' | \sum_{a'} | a' \rangle \langle a' | b' \rangle \\ &= \sum_{b' b''} \langle b' | X | b'' \rangle \langle b'' | b' \rangle \\ &= \sum_{b'} \langle b' | X | b' \rangle \end{aligned} \quad (2.162)$$

isso nos dá que

$$tr(X)_a = tr(X)_b. \quad (2.163)$$

Portanto, o traço de uma matriz qualquer é invariante em relação à mudança de base.

O processo de encontrar os autovalores e autovetores de um operador qualquer B através de elementos da base $\{|a'\rangle\}$ assumindo que são conhecidos. Esta situação é análogo a encontrar matriz unitária que diagonaliza B. A diagonalização é deixar uma matriz na forma:

$$B \equiv \begin{pmatrix} B_{11} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & B_{22} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & B_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (2.164)$$

Este procedimento é muito importante visto que possibilita associa-lo com relação de autovalor e autovetor, assim

$$B|b'\rangle = b'|b'\rangle, \quad (2.165)$$

reescrevendo a expressão como

$$\sum_{a'} \langle a''|B|a'\rangle \langle a'|b'\rangle = b' \langle a''|b'\rangle. \quad (2.166)$$

Dá equação (2.166) temos a forma matricial

$$\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} & \cdots \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} & \cdots \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1^{(l)} \\ C_2^{(l)} \\ C_3^{(l)} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_1^{(l)} \\ C_2^{(l)} \\ C_3^{(l)} \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

Sendo que $B_{ij} = \langle a^{(i)}|B|a^{(j)}\rangle$ e $C_k^{(l)} = \langle a^{(k)}|b^{(l)}\rangle$, as soluções só serão possíveis apenas se a equação a seguir for

$$\det(B - \lambda 1) = 0. \quad (2.167)$$

Dá as raízes obtidas de λ correspondem aos vários $b^{(l)}$.

2.5.2 Observáveis equivalentes unitários

Teorema: Considere dois conjuntos de vetores de base ortonormais $\{|a'\rangle\}$ e $\{|b'\rangle\}$, relacionados através do operador $U = \sum_k |b^{(l)}\rangle \langle a^{(l)}|$. Conhecendo U, podemos construir uma transformação unitária de A, UAU^{-1} ; neste caso, A e UAU^{-1} são denominados de observáveis equivalentes. Com a equação de autovalor dado por

$$A|a^{(l)}\rangle = a^{(l)}|a^{(l)}\rangle \quad (2.168)$$

Atuando U do lado esquerdo do A , temos

$$UAU^{-1}U|a^{(l)}\rangle = Ua^{(l)}|a^{(l)}\rangle \quad (2.169)$$

Dá equação (2.148) podemos escrever

$$(UAU^{-1})|b^{(l)}\rangle = a^{(l)}|b^{(l)}\rangle. \quad (2.170)$$

Fazendo $C = UAU^{-1}$, vem que

$$C|b^{(l)}\rangle = a^{(l)}|b^{(l)}\rangle. \quad (2.171)$$

Neste caso, o C e o A compartilham o mesmo autovetor. Concluindo que "observáveis equivalentes por transformação unitária ($AeUAU^{-1}$) possuem o mesmo espectro de autovalores e que $|b^{(l)}\rangle$ são autoestados de C e UAU^{-1} . Se dois operadores possuem os mesmos autovetores, então, eles podem ser diagonalizados simultaneamente, o que significa que podem ser medidos simultaneamente.

3 TRANSLAÇÃO ESPACIAL

3.1 Posição, Momento e translação

3.1.1 Espectros contínuos

Agora vamos tratar o caso em que observáveis possui autovalores contínuos. Na MQ, existem operadores nos quais seus observáveis físicos podem admitir valores contínuos, e não discretos como visto nos casos anteriores. Exemplos: operador posição, operador momento. Estas grandezas também são representadas por um operadores hermitianos[9]. No caso em que o espectro é contínuo, a equação de autovalores é dado por

$$\hat{\xi}|\xi'\rangle = \xi'|\xi'\rangle, \quad (3.1)$$

onde ξ' é um operador e ξ' é um número. Na mesma equação, $|\xi'\rangle$ é um autovetor do operador $\hat{\xi}$ semelhante a $|a'\rangle$ que é autovetor do operador \mathbf{A} tendo autovalor a' . A diferença entre \mathbf{A} e $\hat{\xi}$ é que o \mathbf{A} assumia um conjunto $\{a'\}$ de autovalores, ao passo que $\hat{\xi}$ assume um espectro contínuo ξ' de autovalores.

A seguir construímos uma tabela que mostra a conversão de espectro discreto para contínuo. Veja a tabela 01.

Tabela 1 – As principais correlações entre espectro discreto e contínuo

Momentos	Espectro discreto	Espectro contínuo
Ortogonalidade	$\langle a'' a'\rangle = \delta_{a'a''}$	$\langle \xi' \xi''\rangle = \delta(\xi' - \xi'')$
Completeza	$\sum_{a'} a'\rangle \langle a' = 1$	$\int d\xi' \xi'\rangle \langle \xi' = 1$
Base	$ \alpha\rangle = \sum_{a'} \langle a' \alpha\rangle a'\rangle$	$ \alpha\rangle = \int d\xi' \langle \xi' \alpha\rangle \xi'\rangle$
Probabilidade	$\sum_{a'} \langle a' \alpha\rangle ^2 = 1$	$\int d\xi' \langle \xi' \alpha\rangle ^2 = 1$
Produto interno	$\langle \beta \alpha\rangle = \sum_{a'} \langle a' \alpha\rangle \langle a' \beta\rangle$	$\langle \beta \alpha\rangle = \int d\xi' \langle \beta \xi'\rangle \langle \xi' \alpha\rangle$
Matriz	$\langle a'' A a'\rangle = a' \delta_{a'a''}$	$\langle \xi' \hat{\xi} \xi''\rangle = \xi' \delta(\xi' - \xi'')$

3.1.2 Autovetores de posição e medidas de posição

Discutimos anteriormente a questão da medida na MQ, no decorrer da discussão abordamos o processo de seletiva. A discussão que será feita nesta seção servirá de base para entender ideia da medição de observáveis que apresentam um espectro contínuo. Considere o operador \mathbf{X} como sendo responsável por uma medida da "coordena X" de uma partícula que se

encontra em autoestado do operador \mathbf{X} , temos que

$$X|x'\rangle = x'|x'\rangle. \quad (3.2)$$

A relação acima significa, fisicamente, que a partícula sendo medido encontra-se no próprio autoestado do operador. Na mesma expressão, x' é um número com dimensão de comprimento (cm) enquanto $|x'\rangle$ representa autovetor do operador \mathbf{X} . O ket $|\alpha\rangle$ de um estado físico qualquer pode ser expandido em termos de $\{|x'\rangle\}$:

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle, \quad (3.3)$$

Aqui, a integral é estendido ao infinito pois avaliamos a informação da posição de uma partícula ao ser localizado sobre o "eixo x' ". Suponha que seja colocada um detector de partícula na posição x' , que dispara um sinal assim que a partícula passar por ele. Assim que detector disparar podemos afirmar que o estado é representado por $|x'\rangle$, ou seja, $|\alpha\rangle$ colapsa para $|x'\rangle$. No entanto, o detector não pode medir a posição exata da partícula, mas pode localizá-la num pequeno intervalo em torno do x' , expressa assim $(x' - \frac{\Delta}{2}, x' + \frac{\Delta}{2})$. Quando se registra uma contagem em um detector deste tipo, o ket de estado muda imediatamente da seguinte forma [9]:

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx''|x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{medição}} \int_{x' - \frac{\Delta}{2}}^{x' + \frac{\Delta}{2}} dx''|x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle. \quad (3.4)$$

Mantendo $\langle x''|\alpha\rangle$ inalterado neste intervalo, a probabilidade de encontrar a partícula entre $x' - \frac{\Delta}{2}$ e $x' + \frac{\Delta}{2}$ é dado por

$$|\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx', \quad (3.5)$$

e para encontrar a partícula em qualquer lugar dentro intervalo definido $(-\infty \text{ e } \infty)$ a probabilidade é dado da seguinte forma:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx' |\langle x'|\alpha\rangle|^2, \quad (3.6)$$

supondo que $|\alpha\rangle$ for normalizado, teremos então

$$\langle \alpha|\alpha\rangle = 1 \implies \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \alpha|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = 1. \quad (3.7)$$

Sendo que $\langle x'|\alpha\rangle$ é uma função de onda para o estado físico representado por $|\alpha\rangle$ [9]. Generalizando a noção de autoestado discutida até aqui em uma dimensão para três dimensões. De acordo com [9], na mecânica não relativística, os autoestados $|\mathbf{x}'\rangle$ de posição são completos.

Então, é possível expandir em termos dos $\{|\mathbf{x}'\rangle\}$ o vetor de estado de uma partícula com graus de liberdade internos ignorados, assim

$$|\alpha\rangle = \int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle, \quad (3.8)$$

onde $|\mathbf{x}'\rangle$ é autovetor dos observáveis x, y e z :

$$|\mathbf{x}'\rangle \equiv |x', y', z'\rangle \quad (3.9)$$

onde os operadores $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ podem ser escritos como:

$$\hat{x}|\mathbf{x}'\rangle = x'|\mathbf{x}'\rangle \quad (3.10)$$

$$\hat{y}|\mathbf{y}'\rangle = y'|\mathbf{y}'\rangle \quad (3.11)$$

$$\hat{z}|\mathbf{z}'\rangle = z'|\mathbf{z}'\rangle \quad (3.12)$$

disto segue que

$$[x_i, x_j] = 0 \quad (3.13)$$

ou seja, as componentes do operador posição tridimensional comutam entre si.

3.1.3 Translação

Agora vamos introduzir o conceito de translação ou deslocamento espacial. Definiremos um operador $\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}$, como sendo um operador translação infinitesimal, responsável pelo deslocamento espacial de um estado quântico. Suponha que

$$|\mathbf{x}'\rangle \xrightarrow{\text{translação}} |\mathbf{x} + d\mathbf{x}'\rangle \quad (3.14)$$

então

$$\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'} |\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle e^{i\delta}, \quad (3.15)$$

note que $d\mathbf{x}'$ é um vetor infinitesimal de deslocamento e δ é uma constante de fase que por conveniência vamos escolher como zero (0).

$$\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'} |\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle. \quad (3.16)$$

Observe que o lado direito de (3.16) é um autovetor de posição, porém desta vez com autovalor igual a $\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'$. Perceba que $|\mathbf{x}'\rangle$ não é autoestado de $\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}$.

Expandindo um autoestado quântico qualquer $|\alpha\rangle$ em termos de $|\mathbf{x}'\rangle$ e atuando o operador translação sobre $|\alpha\rangle$, temos

$$|\alpha\rangle \longrightarrow \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}|\alpha\rangle = \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'} \int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle = \int d^3x' |\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle. \quad (3.17)$$

Reescrevendo o lado direito de (3.17), vem

$$\int d^3x' |\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle = \int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}' - d\mathbf{x}'|\alpha\rangle \quad (3.18)$$

A integração acima é feita sobre todo o espaço e \mathbf{x}' é apenas uma variável de integração. Pois, a translação de estado quântico significa uma translação do sistema de coordenadas na direção oposta. Agora vamos construir uma expressão para operador $\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}$ que obedece certas propriedades. A seguir listamos as propriedades do operador translação infinitesimal $\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}$.

1ª Propriedade (**Conservação da norma**): Se ket $|\alpha\rangle$ é normalizado em 1, então $|\beta\rangle = \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}|\alpha\rangle$ também deve ser normalizado em 1, portanto

$$\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}|\alpha\rangle = |\beta\rangle \longleftrightarrow \langle \beta| = \langle \alpha|\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}^\dagger \quad (3.19)$$

$$\langle \beta|\beta\rangle = \langle \alpha|\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}^\dagger \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}|\alpha\rangle = 1 \quad (3.20)$$

$$\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}^\dagger \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'} = 1. \quad (3.21)$$

Confirmando desta forma que a norma de um ket é preservada por transformação unitária.

2ª Propriedade (**translação sucessivas**): Duas translação sucessivas não necessária precisam estar na mesma direção devem ser equivalente a uma única translação, de tal modo que

$$\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}''} \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'} = \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'' + d\mathbf{x}'}. \quad (3.22)$$

3ª Propriedade (**translação inversa**): Uma translação na direção oposta deve corresponder ao operador inverso.

$$\mathfrak{S}_{-d\mathbf{x}'} = \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}^{-1}, \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}_{-d\mathbf{x}'}|\beta\rangle &= \int d^3\mathbf{x}' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}' + d\mathbf{x}'|\beta\rangle \\ &= \int d^3\mathbf{x}' |\mathbf{x}' - d\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'|\beta\rangle \\ &= \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}^{-1} \int d^3\mathbf{x}' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'|\beta\rangle \end{aligned} \quad (3.24)$$

usando a completudeza, vem

$$\mathfrak{S}_{-d\mathbf{x}'}|\beta\rangle = \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}^{-1}|\beta\rangle. \quad (3.25)$$

4ª Propriedade (**limite infinitesimal**): o operador $\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}$ deve convergir para identidade no limite em que $d\mathbf{x}'$ tende zero (0).

$$\lim_{d\mathbf{x}' \rightarrow 0} \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'} = 1 \quad (3.26)$$

e que a diferença entre $\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}$ e o operador identidade seja de primeira ordem em $d\mathbf{x}'$ [9]. Tomando $\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}$ como sendo

$$\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'} = 1 - i\mathbf{k} \cdot d\mathbf{x}'. \quad (3.27)$$

sendo que as componentes de $\mathbf{k}, k_x, k_y, k_z$ operadores hermitiano, demonstraremos que todas as quatro propriedades são satisfeitas. Provando a primeira propriedade de seguinte modo:

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}^\dagger \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'} &= (1 + i\mathbf{k}^\dagger \cdot d\mathbf{x}') (1 - i\mathbf{k} \cdot d\mathbf{x}') \\ &= 1 - i(\mathbf{k} - \mathbf{k}^\dagger) \cdot d\mathbf{x}' + 0[(d\mathbf{x}')^2] \\ &\simeq 1, \end{aligned} \quad (3.28)$$

os termos de maior ordem que $d\mathbf{x}'$ foram ignorados uma que estamos a travar de uma translação infinitesimal. Agora pode ser confirmada a segunda propriedade,

$$\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}^\dagger \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'} = (1 - i\mathbf{k} \cdot d\mathbf{x}'')(1 - i\mathbf{k} \cdot d\mathbf{x}') \quad (3.29)$$

$$\simeq 1 - i\mathbf{k} \cdot (d\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'') \quad (3.30)$$

$$= \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'+d\mathbf{x}''}. \quad (3.31)$$

A 3ª e 4ª Propriedades são claramente satisfeitas por (3.27). Então, podemos começar verificando a relação existente entre o operador \hat{X} (posição) e o operador \hat{K} .

$$\mathbf{x}\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}|\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle = (\mathbf{x}' + d\mathbf{x}')|\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle \quad (3.32)$$

$$\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}\mathbf{x}'|\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{x}'|\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle \quad (3.33)$$

Então,

$$[\hat{X}, \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}]|\mathbf{x}'\rangle = d\mathbf{x}'|\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle \quad (3.34)$$

Agora expandindo o $|\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle$, temos

$$|\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle \approx |\mathbf{x}'\rangle + \nabla \cdot |\mathbf{x}\rangle \cdot d\mathbf{x}' \quad (3.35)$$

logo,

$$[\hat{X}, \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}] |\mathbf{x}'\rangle \approx d\mathbf{x}' |\mathbf{x}'\rangle \quad (3.36)$$

Pois, os termos seguintes a $d\mathbf{x}'$ são do tipo $0(d^2\mathbf{x}')$. O ket $|\mathbf{x}'\rangle$ pode ser qualquer ket de posição, e os kets de posição, como sabemos, formam um conjunto completo [9]. O que devemos ter, portanto, é um operador identidade

$$[\mathbf{x}, \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}] = d\mathbf{x}', \quad (3.37)$$

interessados em descobrir quem é \mathfrak{S} . Então, se $[\hat{X}, \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}] \approx d\mathbf{x}$, podemos afirmar algumas propriedades de \mathbf{k}

$$\begin{aligned} \mathbf{x}\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'} - \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}\mathbf{x} &= d\mathbf{x}' \\ \mathbf{x}(1 + i\mathbf{k} \cdot d\mathbf{x}') - (1 + i\mathbf{k} \cdot d\mathbf{x}')\mathbf{x} &= \\ i[\mathbf{x}(\mathbf{k} \cdot d\mathbf{x}') - (\mathbf{k} \cdot d\mathbf{x}')\mathbf{x}] &= d\mathbf{x}' \end{aligned}$$

Segundo [9], o lado direito da última linha equação anterior, $d\mathbf{x}'$ deve ser compreendido como sendo número multiplicado pelo operador identidade no espaço de kets gerados por $|\mathbf{x}'\rangle$. Supondo que $d\mathbf{x}'$ está na direção de \mathbf{x}_j e formarmos o produto escalar \mathbf{x}_i , encontramos

$$[x_i, \mathbf{k}_j] = i\delta_{ij}, \quad (3.38)$$

do ponto vista físico, a equação (3.30) significa que \mathbf{X} não comuta com \mathbf{k} quando se encontram com componentes $[j,j]$, entretanto, se as componentes forem diferentes, por exemplo $[i,j]$ eles comutam.

3.1.4 Momento como gerador da translação

Em 1924, Louis de Broglie prôpos que toda a matéria possuía comportamento ondulatório de tal forma que o momento linear associado p uma partícula possuía ligação direto com o comprimento de λ mediante a constante de h obtida anteriormente por Planck para explicar a emissão de radiação por objetos aquecidos (corpo negro) [22], assim

$$P = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi h}{\lambda}, \quad (3.39)$$

então fazendo

$$\frac{2\pi}{\lambda} = |\vec{q}| \implies \frac{2\pi h}{\lambda h} = |\vec{q}| \implies \frac{P}{\hbar} = |\vec{q}| \quad (3.40)$$

$$P = \hbar|\vec{q}|, \quad (3.41)$$

considerando o momento linear de de Broglie p com o operador momento linear \hat{p} (vetor) e fazendo $\vec{q} = -i\nabla$, temos

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla \quad (3.42)$$

agora supondo que $\nabla = \frac{\hat{p}}{-i\hbar}$, podemos escrever o operador infinitesimal assim

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'} &= 1 - \frac{p \cdot d\mathbf{x}'}{-i\hbar} \\ &= 1 - \frac{ipd\mathbf{x}'}{\hbar}, \end{aligned} \quad (3.43)$$

sendo que p é o operador momento, ou seja o \hat{p} é o gerador de translação na MQ. Assumindo que $\mathbf{k} = i\nabla$ e $\nabla = \frac{\hat{p}}{i\hbar}$ a equação (3.35) passa a ser

$$[x_i, -\frac{\hat{p}_j}{\hbar}] = -i\delta_{ij} \quad (3.44)$$

$$[x_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}. \quad (3.45)$$

As relações de comutação (3.45) nos diz que as componentes x e p_x correspondentes aos operadores \hat{X} e \hat{P} não comutam entre si, de forma que são operadores incompatíveis. Portanto, obtemos assim a famosa relação de incereza posição-momento de W. Heisenberg:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p_x)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (3.46)$$

Note que para chegarmos a relação de incerteza de posição-momento de Heisenberg, partimos de princípios intuitivos muito simples que são as propriedades de operador translação, usando essas propriedades conseguimos fazer construções que culminou com a celebre relação. Essa construção teórica só foi possível graças a notação de Dirac (bras e kets).

Agora estamos interessados em expressar o operador $\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}$ para translação infinitesimal ,ou seja, um deslocamento espacial por uma dimensão finita. Para isso, vamos tomar $\Delta\mathbf{x}'$ como sendo um deslocamento não infinitesimal, então uma translação finita na direção x por uma distância $\Delta x'$ será dado por

$$\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}|\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}' + \Delta\mathbf{x}'\rangle. \quad (3.47)$$

Supondo que a translação finita é equivalente a um conjunto sucessivo de translação infinitesimal, então

$$d\mathbf{x}' = \frac{\Delta x}{n} \implies \mathfrak{S}_{\Delta x} = \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}}\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}}\dots\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}} \quad (3.48)$$

sendo n a composição de translação infinitesimais, subdividindo um intervalo finito $\Delta x'$ em infinitos intervalos infinitesimal, teremos $\frac{\Delta x'}{n}$. Logo,

$$\mathfrak{S}_{\Delta x} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i\hat{p} \cdot \Delta x}{\hbar n} \right)^n \quad (3.49)$$

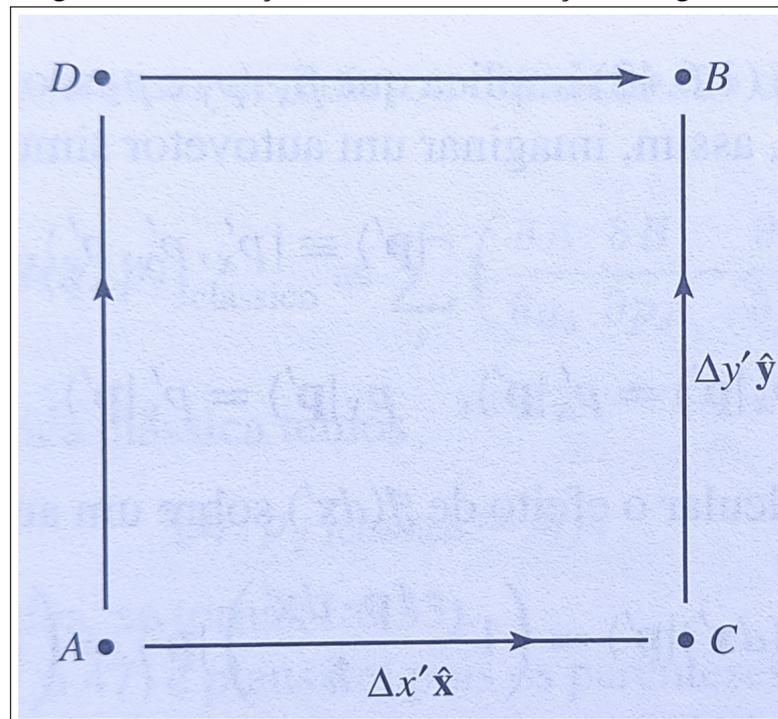
$$\mathfrak{S}_{\Delta x} = \exp \left(-\frac{i p_x \hat{\Delta x}'}{\hbar} \right). \quad (3.50)$$

A expressão $\exp \left(-\frac{i p_x \hat{\Delta x}'}{\hbar} \right)$ na equação (3.50) deve ser compreendida como uma função do operador p_x , generalizando para qualquer X temos

$$\exp(X) \equiv 1 + X + \frac{X^2}{2!} + \frac{X^3}{3!} + \dots, \quad (3.51)$$

essa expansão deve se convergir.

Figura 7 – Translação sucessivas em direções ortogonais



Fonte: Sakurai: Mecânica Quântica Moderna

Uma propriedade fundamental das translações é que aplicações sucessivas em diferentes direções comutam [9]. Esta afirmação pode ser observada na figura 7, não importa cominho seguido, se passarmos por C ou D desde já que essa translação for em direções ortogonais. Matematicamente, temos

$$\mathfrak{S}_{\Delta y'} \mathfrak{S}_{\Delta x'} = \mathfrak{S}_{(\Delta x' + \Delta y')}, \quad (3.52)$$

$$\mathfrak{S}_{\Delta x' \hat{x}} \mathfrak{S}_{\Delta y' \hat{y}} = \mathfrak{S}_{(\Delta x' \hat{x} + \Delta y' \hat{y})}. \quad (3.53)$$

Agora considere que $\Delta x'$ e $\Delta y'$ vai até a segunda ordem, assim

$$\mathfrak{S}_{\Delta y} = 1 - \frac{ip_y \Delta y'}{\hbar} - \frac{ip_y^2 (\Delta y')^2}{2\hbar^2} + \dots, \quad (3.54)$$

$$\mathfrak{S}_{\Delta x'} = 1 - \frac{ip_x \Delta x'}{\hbar} - \frac{ip_x^2 (\Delta x')^2}{2\hbar^2} + \dots \quad (3.55)$$

fazendo $[\mathfrak{S}_{\Delta y'}, \mathfrak{S}_{\Delta x'}]$, temos

$$\begin{aligned} [\mathfrak{S}_{\Delta y'}, \mathfrak{S}_{\Delta x'}] &= \left[\left(1 - \frac{ip_y \Delta y'}{\hbar} - \frac{ip_y^2 (\Delta y')^2}{2\hbar^2} + \dots \right), \left(1 - \frac{ip_x \Delta x'}{\hbar} - \frac{ip_x^2 (\Delta x')^2}{2\hbar^2} + \dots \right) \right] \\ &\simeq -\frac{[p_y, p_x] (\Delta x') (\Delta y')}{\hbar^2}. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Como $\Delta y'$ e $\Delta x'$ são arbitrários, então a parte esquerda da equação (3.56) é zero, ou

$$[\mathfrak{S}_{\Delta y'}, \mathfrak{S}_{\Delta x'}] = 0, \quad (3.57)$$

consequentemente leva a

$$[p_x, p_y] = 0, \quad (3.58)$$

de modo generalizado, temos

$$[p_i, p_j] = 0. \quad (3.59)$$

A relação de comutação acima é uma consequência direta do fato de que translações em direções ortogonais comutam [9]. E quando os geradores de uma transformação comutam entre si, esse grupo formado por eles é denominado de Abelian, por exemplo o caso da translação em três dimensões.

Da equação (3.59) implica que p_x, p_y e p_z são observáveis mutuamente compatíveis, logo podem ter um autovetor simultâneo de p_x, p_y e p_z , assim

$$|\mathbf{p}\rangle \equiv |p_x, p_y, p_z\rangle, \quad (3.60)$$

$$p_x |\mathbf{p}'\rangle = p'_x |\mathbf{p}'\rangle, \quad (3.61)$$

$$p_y |\mathbf{p}'\rangle = p'_y |\mathbf{p}'\rangle, \quad (3.62)$$

$$p_z |\mathbf{p}'\rangle = p'_z |\mathbf{p}'\rangle. \quad (3.63)$$

Agora vamos investigar o efeito de $\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}$ quando atua sobre um autovetor de momento:

$$\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'} |\mathbf{p}'\rangle = \left(1 - \frac{ip_x \cdot d\mathbf{x}'}{\hbar} \right) |\mathbf{p}\rangle = \left(1 - \frac{ip'_x \cdot d\mathbf{x}'}{\hbar} \right) |\mathbf{p}'\rangle. \quad (3.64)$$

Podemos ver que da equação (3.64) o autovetor momento permanece inalterado, mesmo sofrendo uma pequena mudança de fase. Portanto, $|\mathbf{p}'\rangle$ é um autovetor de $\mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}$, diferentemente de $|\mathbf{x}'\rangle$ na equação (3.16), então

$$[\mathbf{p}, \mathfrak{S}_{d\mathbf{x}'}] = 0. \quad (3.65)$$

O operador translação não vai ser um observável físico porque ser um observável físico, ele precisa ser hermitiano, e já vimos que

$$\mathfrak{S}_{\Delta\mathbf{x}}^\dagger = \mathfrak{S}_{(-\Delta\mathbf{x})} \neq \mathfrak{S}_{\Delta\mathbf{x}}, \quad (3.66)$$

ou seja, o operador $\mathfrak{S}_{\Delta\mathbf{x}}$ não é hermitiano.

3.2 Funções de onda no espaço de posição

Nesta seção vamos trabalhar justamente as representações de função de onda, de forma explícita, como a representação da função de onda tanto nas posições quanto nos momento. o estado quântico de um sistema físico ela existe por si só, ou seja, não depende da representação. A representação de um estado quântico qualquer $|\alpha\rangle$ no espaço vetorial gerados pelos autoestados do operador \hat{X} , pode ser expandido em termos de $|x'\rangle$,

$$|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle, \quad (3.67)$$

onde o coeficiente da expansão $\langle x'|\alpha\rangle$ possui a interpretação da probabilidade,

$$|\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx' \quad (3.68)$$

representa a probabilidade de encontrar uma partícula entre x' e $x' + dx'$. O produto interno $\langle x'|\alpha\rangle$ é análogo a $\psi_\alpha(x')$, na descrição elementar da MQ:

$$\langle x'|\alpha\rangle = \psi_\alpha(x'). \quad (3.69)$$

Aqui, o produto interno $\langle x'|\alpha\rangle$ desempenha a mesma "função" que o coeficiente de expansão (c_a), no caso discreto. Pois, uma das principais vantagens desse formalismo, que sua origem em Dirac, é que os dois tipos de interpretação probabilística são unificados: $\psi_\alpha(x')$ é um coeficiente da expansão, da mesma forma que $c_{a'}$ o é [9].

Agora estamos interessados em saber como podemos expressar o produto interno $\langle\beta|\alpha\rangle$ no espaço das posições, então

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \int dx'' \langle\beta|x''\rangle \langle x''|\int dx' |x'\rangle \langle x'| \quad (3.70)$$

lembrando que $\langle x'|x' \rangle = \delta(x' - x'')$, então

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \int dx' \langle \beta | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle \quad (3.71)$$

$$= \int dx' \psi_{\beta}^*(x') \psi_{\alpha}(x') \quad (3.72)$$

temos $\psi_{\beta}^*(x')$ por causa da inversão do $|\beta\rangle$ para $\langle \beta|$, ou seja, ele é correspondente dual. O Produto $\langle \beta | \alpha \rangle$ caracteriza uma integral de sobreposição, comumente chamado por integral de Overlap. O termo $\langle \beta | \alpha \rangle$ que é independente da representação, pode ser interpretado como a amplitude da probabilidade do estado $|\alpha\rangle$ ser encontrado no estado $|\beta\rangle$.

Anteriormente escrevemos que $A|a'\rangle = a'|a'\rangle$, no caso discreto e a expansão era:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'}^{\alpha} |a'\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle, \quad (3.73)$$

agora multiplicado a equação (3.70) pelo bra da posição $\langle x'|$ pela esquerda, temos

$$\langle x' | \alpha \rangle = \sum_{a'} \langle x' | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle. \quad (3.74)$$

Da Mecânica Ondulatório, esta expressão é reconhecida como:

$$\psi_{\alpha}(x') = \sum_{a'} c_{a'} u_{a'}(x'), \quad (3.75)$$

onde $u_{a'}(x') = \langle x' | a' \rangle$ é a autofunção de operador A representado espaço de x, com autovalor a' .

Agora vamos investigar como a expressão $\langle \beta | A | \alpha \rangle$ pode ser escrito fazendo uso das funções de onda para $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$, vem

$$\langle \beta | A | \alpha \rangle = \int dx'' \langle \beta | x'' \rangle A \int dx' \langle x' | \alpha \rangle |x'\rangle \quad (3.76)$$

$$= \int dx'' \int dx' \langle \beta | x'' \rangle \langle x'' | A | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle \quad (3.77)$$

$$= \int dx'' \int dx' \psi_{\beta}^*(x'') \langle x'' | A | x' \rangle \psi_{\alpha}(x'). \quad (3.78)$$

Verificamos que, para calcular $\langle \beta | A | \alpha \rangle$ é necessário determinar primeiro os elementos de matriz $\langle x'' | A | x' \rangle$.

Mas se $A = f(x')$, então:

$$\langle x'' | f(x) | x' \rangle = f(x') \delta(x' - x''). \quad (3.79)$$

Por exemplo, se $A = x^2$, então

$$\langle x'' | x^2 | x' \rangle = x'^2 \langle x'' | x' \rangle = x'^2 \delta(x' - x''), \quad (3.80)$$

usando as informações da equação (3.77), a integral dupla (3.75) torna-se:

$$\langle \beta | x^2 | \alpha \rangle = \int dx' \langle \beta | x' \rangle x'^2 \langle x' | \alpha \rangle \quad (3.81)$$

$$= \int dx' \psi_\beta^*(x') x'^2 \psi_\alpha(x'). \quad (3.82)$$

Em geral, quando possuir uma função explicitamente só de x' é possível afirmar que:

$$\langle \beta | f(x) | \alpha \rangle = \int dx' \psi_\beta^*(x') f(x') \psi_\alpha(x'). \quad (3.83)$$

3.2.1 Operador momento na base de autovetor de posição

Agora vamos verificar como fica a representação do operador momento \hat{p} no espaço de posição x' . Lembrando que definimos anteriormente o operador translação infinitesimal como:

$$\mathfrak{T}_{dx'} = \left(1 - \frac{ipdx'}{\hbar} \right). \quad (3.84)$$

Atuando o operador translação no estado qualquer $|\alpha\rangle$, temos

$$\left(1 - \frac{ipdx'}{\hbar} \right) |\alpha\rangle = \int dx'' \left(1 - \frac{ipdx'}{\hbar} \right) |x''\rangle \langle x'' | \alpha \rangle \quad (3.85)$$

$$\mathfrak{T}_{dx'} |x'\rangle = \int dx'' \mathfrak{T}_{dx'} |x''\rangle \langle x'' | \alpha \rangle. \quad (3.86)$$

Assim,

$$\mathfrak{T}_{dx'} |\alpha\rangle = \int dx' |x' + dx'\rangle \langle x'' | \alpha \rangle, \quad (3.87)$$

fazendo a mudança de variável, temos

$$x' + dx' = x'' \implies dx' = dx'' \quad (3.88)$$

$$\mathfrak{T}_{dx'} |\alpha\rangle = \int dx'' |x''\rangle \langle x'' - dx'' | \alpha \rangle. \quad (3.89)$$

Expandindo em termos de série de Taylor o termo $\langle x'' - dx'' | \alpha \rangle$, temos

$$\langle x'' - dx'' | \alpha \rangle \approx \langle x'' | \alpha \rangle - (dx'') \frac{d}{dx''} \langle x'' | \alpha \rangle, \quad (3.90)$$

substituindo o resultado da expansão na equação (3.86), temos

$$\mathfrak{T} - dx' |\alpha\rangle = \int dx'' |x''\rangle \left[\langle x'' | \alpha \rangle - (dx'') \cdot \frac{d}{dx''} \langle x'' | \alpha \rangle \right]. \quad (3.91)$$

Comparando a equação (3.81) com a (3.87), temos que:

$$(dx') - \frac{ip}{\hbar} |\alpha\rangle = \int dx'' |x''\rangle \left(-(dx') \frac{d}{dx''} \langle x'' | \alpha \rangle \right) \quad (3.92)$$

$$p |\alpha\rangle = \int dx'' |x''\rangle \left(-i\hbar \frac{d}{dx''} \langle x'' | \alpha \rangle \right) \quad (3.93)$$

ou

$$\langle x' | p | \alpha \rangle = i\hbar \frac{d}{dx'} \langle x' | \alpha \rangle, \quad (3.94)$$

pois, usamos a ortogonalidade para eliminar o integral. Para o elemento de matriz p na representação x , obtemos

$$\langle x' | p | x'' \rangle = -i\hbar \frac{d}{dx'} \delta(x' - x''). \quad (3.95)$$

Desta forma $\langle \beta | p | \alpha \rangle$ torna-se:

$$\langle \beta | p | \alpha \rangle = \int dx' \langle \beta | x' \rangle \left(-i\hbar \frac{d}{dx'} \langle x' | \alpha \rangle \right) \quad (3.96)$$

$$= \int dx' \psi_{\beta}^*(x') \left(-i\hbar \frac{d}{dx'} \right) \psi_{\alpha}(x'). \quad (3.97)$$

Agora se repetirmos essa derivada varias vezes, ou seja, repetindo para p^n

$$\langle x' | p^n | \alpha \rangle = (-i\hbar)^n \frac{d^n}{dx'^n} \langle x' | \alpha \rangle \quad (3.98)$$

$$\langle \beta | p^n | \alpha \rangle = \int dx' \psi_{\beta}^*(x') (-i\hbar)^n \frac{d^n}{dx'^n} \psi_{\alpha}(x'). \quad (3.99)$$

Portanto, encontramos que o operador momento \hat{p} representado no espaço das posições é relacionado a um operador diferencial.

4 EVOLUÇÃO TEMPORAL

Até então estudamos todos os estados quânticos de forma estacionária, não existindo uma dinâmica temporal desses estados. Em outras palavras, o sistema físico não evolui sob efeito de um hamiltoniano. Neste capítulo o estudo será feito com foco em compreender como é que os sistemas físico se comportam com o passar do tempo.

4.1 Evolução Temporal e Equação de Schrödinger

Nesta seção introduziremos a variável tempo que nos permitirá observar o que acontece com um sistema quântico sob efeito de um hamiltoniano a medida que o tempo transcorre. Mas, para essa introdução da variável tempo precisaremos introduzir primeiro o operador **evolução temporal**. Na MQ, o tempo é meramente parâmetro. Diferentemente da posição, momento e energia que são operadores o tempo não é uma propriedade intrínseca da partícula, pois ele apenas ajuda-nos a perceber se algo muda ou não com o passar do tempo.

4.1.1 Operador evolução temporal

Estamos interessados entender como um ket de estado qualquer muda com o tempo. Considere um sistema físico com vetor de estado em t_0 representado por $|\alpha\rangle$. Em tempos posteriores o sistema não permanecerá inalterado. Então a nova notação para o estado em tempo posterior será:

$$|\alpha, t_0, t\rangle, \quad (t > t_0), \quad (4.1)$$

onde α e t_0 representam um tempo anterior que serve de referência, no estado $|\alpha\rangle$. Uma vez partido da suposição que tempo contínuo, esperamos que

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\alpha, t_0, t\rangle = |\alpha\rangle, \quad (4.2)$$

então podemos usar

$$|\alpha, t_0, t_0\rangle = |\alpha, t_0\rangle. \quad (4.3)$$

Ampliando a notação denominado $|\alpha, t_0, t\rangle$ de um estado quântico qualquer que evoluiu a partir de t_0 inicial até um t qualquer. Estamos interessados em encontrar um operador $U(t, t_0)$ que leva o estado $|\alpha, t_0, t_0\rangle$ até $|\alpha, t_0, t\rangle$. O operador que faz esse deslocamento é chamado de **operador**

de evolução temporal:

$$|\alpha, t_0, t\rangle = U(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle. \quad (4.4)$$

O procedimento aqui será o mesmo feito que do operador translação, o nosso operador precisa obedecer certas propriedades. A primeira é a unitariedade: se o ket representa o estado que estava normalizado em 1, então nos tempos posteriores ele deve permanecer normalizado. Considere que exista um operador qualquer A que gera uma base completa $|a'\rangle$ em t_0 , podemos expandir

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t_0)|a'\rangle. \quad (4.5)$$

Da mesma forma, num tempo posterior temos

$$|\alpha, t_0, t\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t)|a'\rangle. \quad (4.6)$$

Em geral, esperamos que os coeficientes mudem com o tempo, ou seja:

$$|c_{a'}(t)| \neq |c_{a'}(t_0)|. \quad (4.7)$$

Então a primeira propriedade é expressa matematicamente da seguinte forma:

$$\langle \alpha, t_0 | \alpha, t_0 \rangle \implies \langle \alpha, t_0, t | \alpha, t_0, t \rangle = 1. \quad (4.8)$$

Logo, esta será satisfeita se consideramos que operador é unitário.

$$U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = 1. \quad (4.9)$$

A segunda propriedade que o operador deve obedecer é a composição temporal: para $t_0 < t_1 < t_2$, temos

$$U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1)U(t_1, t_0), \quad (4.10)$$

consequentemente

$$|\alpha, t_0, t_2\rangle = U(t_2, t_0)|\alpha, t_0\rangle = U(t_2, t_1)U(t_1, t_0)|\alpha, t_0\rangle, \quad (4.11)$$

o que esta propriedade quer nos transmitir é que quando queremos encontrar a evolução temporal de t_0 a t_2 , é possível obtê-la através de uma evolução de t_0 a t_1 em seguida de t_1 a t_2 [9]. Perceba também que em (4.11) a leitura deve ser feita da direita para esquerda!

Já terceira propriedade é evolução temporal infinitesimal em que para $dt \rightarrow 0$ o operador $U(t, t_0)$ converge para identidade:

$$\lim_{dt \rightarrow 0} U(t_0 + dt, t_0) = 1, \quad (4.12)$$

do mesmo jeito no caso da translações, esperamos que a diferença entre $U(t_0 + dt, t_0)$ e 1 seja da primeira ordem em dt . Então, podemos propor

$$U(t_0 + dt, t_0) = 1 - i\Omega dt. \quad (4.13)$$

Agora vamos verificar se a equação (4.13) satisfaz as propriedades. Então, podemos verificar que:

$$\begin{aligned} U^\dagger(t_0 + dt, t_0)U(t_0 + dt, t_0) &= (1 + i\Omega^\dagger dt)(1 - i\Omega dt) \\ &= 1 - i\Omega dt + i\Omega^\dagger dt + \Omega^\dagger \Omega (dt)^2 \\ &= 1 + i dt (\Omega^\dagger - \Omega) + \Omega^\dagger \Omega (dt)^2 \end{aligned} \quad (4.14)$$

desta forma,

$$\Omega^\dagger = \Omega, \quad (4.15)$$

concluimos que Ω é hermitiano. Para operador de deslocamento temporal sucessivas (composição temporal) temos

$$\begin{aligned} U(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0) &= U(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0)U(t_0 + dt_1, t_0) \\ &= [1 - i\Omega dt_2][1 - i\Omega dt_1] \\ &= [1 - i\Omega dt_2 - i\Omega dt_1 - \Omega^\dagger dt_1 dt_2] \end{aligned} \quad (4.16)$$

$$U(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0) = 1 - i\Omega(dt_1 + dt_2) \approx 1, \quad (4.17)$$

neste caso, desprezando os termos iguais ou maior que $(dt)^2$.

Note que Ω possui dimensão de s^{-1} (frequência). Se utilizando da expressão para quantização da energia em termos de frequência de uma onda eletromagnética (fóton), temos $E = \hbar\omega$, neste caso, $\omega = \frac{E}{\hbar}(s^{-1})$. Usando o principio da correspondência da Mecânica Clássica para a Quântica, vem ($E \rightarrow H$), então podemos escrever que:

$$U(t_0 + dt, t_0) = 1 - \frac{iH}{\hbar}dt, \quad (4.18)$$

onde E (energia) foi substituída pelo operador hamiltoniano. Pois, presume-se que esse operador hamiltoniano H, seja hermitiano.

4.1.2 Equação de Schrödinger

Com a definição do operador evolução temporal $U(t, t_0)$ temos a condição de derivar a equação de Schrödinger utilizando a propriedade de composição temporal, considerando $t_1 \longrightarrow t, t_2 \longrightarrow t + dt$:

$$U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) \quad (4.19)$$

$$U(t + dt, t_0) = U(t + dt, t)U(t, t_0) \quad (4.20)$$

$$= \left[1 - \frac{iHdt}{\hbar} \right] U(t, t_0), \quad (4.21)$$

entendendo que a diferença $t_1 - t_0$ não necessita ser infinitesimal. Vem

$$U(t + dt, t_0) - U(t, t_0) = -1 \left(\frac{H}{\hbar} \right) dt U(t, t_0). \quad (4.22)$$

Em seguida, transformando a expressão obtida numa equação diferencial:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = HU(t, t_0). \quad (4.23)$$

Assim, encontramos a Equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal. Tudo que se relaciona com a evolução temporal deriva da equação fundamental [9].

Se $U(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle = |\alpha, t_0, t\rangle$, podemos reescrever:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle = HU(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle. \quad (4.24)$$

Como $|\alpha, t_0\rangle$ não depende de t, portanto, isto é igual a

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle = H|\alpha, t_0, t\rangle, \quad (4.25)$$

obtemos assim, a equação de Schrödinger para estado quântico $|\alpha, t_0, t\rangle$. Pois, essa é equação é uma consequência da definição de operador evolução temporal infinitesimal.

Para obtermos a Equação de Schrödinger utilizamos argumentos simples como aquele utilizado para relação de incerteza, só que desta vez usamos as propriedades de operador evolução temporal. Esses argumentos evidenciam o poder da notação de Dirac, visto que conseguimos fazer construção com eles que nos levou a equação de Schrödinger como resultado.

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho apresentamos a notação de bras e kets de forma bem detalhada e mostramos como ela é utilizada na MQ. Percebemos que ela facilita o entendimento dos conceitos visto que na sua abordagem utiliza-se conceitos de vetores, por exemplo cada estado quântico de uma partícula pode ser caracterizado por um vetor de estado advindo álgebra linear. Também concluímos que é preferível trabalhar com a notação de Dirac, pois ela reduz drasticamente a extensão do cálculo e pode ser usada para fazer cálculo sem se referir a uma base específica. Permite ainda aplicação do formalismo da MQ para as situações onde apenas a função de onda espacial não seria suficiente como por exemplo no estudo do spin do elétron. Neste caso, a função de onda espacial não consegue representar o estado quântico do spin, ela nos fornece apenas a probabilidade de encontrar uma partícula numa determinada região do espaço.

Nossas perspectivas se estendem agora, para uma aplicação da notação de bras e kets ao estudo do spin do elétron e ao estudo do oscilador harmônico.

REFERÊNCIAS

- [1] PESSOA JR, Osvaldo. **Histórias contrafactuais: o surgimento da física quântica**. Estudos avançados, v. 14, p. 175-204, 2000.
- [2] DA SILVA SOUZA, Rafaelle. Um recorte histórico das contribuições de Erwin Schrödinger para a Mecânica Quântica. **Ensino Multidisciplinaridade**, p. 42-56.
- [3] VALADARES, Eduardo de Campos; CHAVES; Aloar, ESDRAS, Garcia. Aplicação da Física quântica: do transistor à nanotecnologia. 1a ed. São Paulo, 2005.
- [4] ARAGÃO, Maria José. História da física - Rio de Janeiro: Interciência, 2006.
- [5] ROCHA, José Fernando. Origens e evolução das ideias de física. Salvador: EDUFBA, 2011.
- [6] MARTINS, Roberto de Andrade. Ensaio sobre história e filosofia das ciências I. Extrema: Quamcumque editum, 2021.
- [7] BORRELLI, Arianna. Dirac's bra-ket notation and the notion of a quantum state. In: Styles of Thinking in Science and Technology. Proceedings of the 3rd International Conference of the European Society for the History of Science. 2010. p. 361-371.
- [8] DIRAC, Paul Adrien Maurice. A new notation for quantum mechanics. In: Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. Cambridge University Press, 1939. p. 416-418.
- [9] SAKURAI, Jun Jonh; NAPOLITANO, Jim. Mecânica Quântica Moderna. 2 ed.- Porto Alegre: Bookman, 2013.
- [10] SENISE JUNIOR, Carlos Roberto; VIANA BONINI, Hélio; SUART JUNIOR, José Bento. O conceito de spin em livros didáticos de química geral utilizados em universidades brasileiras. Enseñanza de las ciencias, n. Extra, p. 3833-3838, 2017.
- [11] WIENER, Guilherme Marasca. Valores fracos na mecânica quântica. 2016.
- [12] ROCHA, Carlos Raphael. Inserindo conceitos e princípios de mecânica quântica no ensino médio: estados quânticos e superposição linear de estados. 2015.
- [13] GONÇALVES, Antônio Edson. Mecânica quântica. 2015.

- [14] GOMES, Gerson; PIETROCOLA, Maurício. O experimento de Stern-Gerlach e o spin do elétron: um exemplo de quasi-história. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 33, 2011.
- [15] NETO, Rodolfo Alves de Carvalho. Internalização do significado da Teoria Quântica do processo de medida de acordo com a interpretação da complementaridade.
- [16] PESSOA JR, Osvaldo. O problema de medição na mecânica quântica. Publicado em *Cadernos de História e Filosofia da Ciência (série 3)* 2(2): 177-217, jul-dez 199.
- [17] GRIFFITHS, David Jeffrey. *Mecânica Quântica*; tradução Lara Freitas; revisão técnica Marcelo Mulato.-2 ed.- São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2011.
- [18] SILVA, André Luis Bonfim Bathista. *Introdução a Química Quântica*. 2003.
- [19] MAZIERO, Jonas. A relação de incerteza de Maccone-Pati. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 39, 2017.
- [20] BIALYNICKI-BIRULA, Iwo; RUDNICKI Lukasz. Entropic uncertainty relations in quantum physics. *Statistical Complexity*, p. 1-34, 2011.
- [21] CHIBENI, Silvio Seno. Certezas e incertezas sobre as relações de Heisenberg. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 27, p. 181-192, 2005.
- [22] ROSA, Pedro Sérgio. *Louis de Broglie e as ondas de matéria*. Campinas: Unicamp, 2004.

APÊNDICE A – PRECESSÃO DE SPIN

Nesse apêndice pretendemos abordar uma aplicação importante sobre a dinâmica quântica que é a precessão de spin. O spin realiza o movimento de precessão quando é colocado em uma região onde existe o campo magnético, a interação de spin com o campo magnético uniforme, resulta em um movimento de precessão em torno do eixo da aplicação desse campo.

Supondo que uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ colocado em uma região onde existe campo magnético uniforme \vec{B} , temos o seguinte hamiltoniano:

$$H = - \left(\frac{e}{m_e c} \right) \vec{S} \cdot \vec{B}, \quad (\text{A.1})$$

com $e < 0$ para elétron. Considerando \vec{B} como sendo um campo na direção z, temos

$$H = - \left(\frac{e}{m_e c} \right) \hat{S}_z. \quad (\text{A.2})$$

Perceba que o campo é constante ao longo de todo movimento e que S_z e H diferem apenas por uma constante multiplicativo, então eles comutam. Logo, os autoestados de $|+\rangle$ e $|-\rangle$ que são autoestados do operador S_z também são autoestados do operador H (conhecidos como autoestados simultâneo), esses mesmos autoestados são também chamados de autoestados de energia. Atuando o operador H nos autoestados $|+\rangle$ e $|-\rangle$, temos

$$H|+\rangle = - \left(\frac{e}{m_e c} \right) B S_z |+\rangle = - \left(\frac{e}{m_e c} \right) B \frac{\hbar}{2} |+\rangle \quad (\text{A.3})$$

$$H|-\rangle = - \left(\frac{e}{m_e c} \right) B S_z |-\rangle = + \left(\frac{e}{m_e c} \right) B \frac{\hbar}{2} |-\rangle \quad (\text{A.4})$$

Portanto,

$$E_{\pm} = \mp \frac{e\hbar B}{2m_e c}, \quad (\text{A.5})$$

para $S_z \pm$. Definindo ω como

$$\omega \equiv \frac{|e|B}{m_e c} \quad (\text{A.6})$$

A equação (A.2) passa a ser escrito da seguinte forma:

$$H = \omega S_z \quad (\text{A.7})$$

Pois, podemos agora escrever o operador evolução temporal, uma vez que estamos interessados em saber a dinâmica desse sistema. Toda a informação acerca da evolução temporal está contida no operador evolução temporal [9].

$$U(t, 0) = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{-i\omega S_z t}{\hbar}\right). \quad (\text{A.8})$$

Expandindo este operador no estado inicial e usando os kets $|+\rangle$ e $|-\rangle$ como ket da base, um vez que são autovetores de S_z e de energia. Considerando que em tempo $t = 0$ o sistema seja caracterizado por

$$|\alpha\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle \quad (\text{A.9})$$

Aplicando a equação (A.8), podemos escrever o ket de estado em tempo posterior, assim

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = c_+ \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right) |+\rangle + c_- \exp\left(\frac{+i\omega t}{2}\right) |-\rangle, \quad (\text{A.10})$$

Essa é a expressão de operador evolução temporal neste caso. Com ele é possível descobrir como será a evolução temporal de qualquer estado físico de spin nessa região do campo.

Vamos examinar a situação em que o estado inicial $|\alpha\rangle$ represente o estado de spin $|+\rangle$, assim $|\alpha(0)\rangle = |+\rangle$ temos

$$|\alpha(t)\rangle = U(t) |\alpha(0)\rangle \quad (\text{A.11})$$

$$= U(t) |+\rangle \quad (\text{A.12})$$

então,

$$|\alpha(t)\rangle = c_+ \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right) |+\rangle \quad (\text{A.13})$$

Significa que mesmo em um tempo posterior o estado de spin permanecerá ainda para cima.

Agora supondo que o estado inicialmente se encontra em S_x+ , ou seja, $|\alpha(0)\rangle = |S_x; +\rangle$, onde

$$|S_x; +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle. \quad (\text{A.14})$$

Nesse caso, temos

$$|\alpha(t)\rangle = U(t)|\alpha(0)\rangle \quad (\text{A.15})$$

$$= U(0)|S_x; +\rangle \quad (\text{A.16})$$

$$= \left[c_+ \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right)|+\rangle + c_- \exp\left(\frac{+i\omega t}{2}\right)|-\rangle \right] |S_x; +\rangle \quad (\text{A.17})$$

Fazendo algumas manipulações, chegamos a

$$|\alpha(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[c_+ \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right)|+\rangle + c_- \exp\left(\frac{+i\omega t}{2}\right)|-\rangle \right]. \quad (\text{A.18})$$

Com isso, vamos agora calcular as probabilidades de encontrar o sistema nos estados $S_x\pm$ para um certo tempo posterior:

$$\begin{aligned} \text{Prob. } |S_x\pm\rangle &= |\langle S_x\pm | \alpha, t \rangle|^2 \\ &= \left| \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle \right) \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right)|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(\frac{+i\omega t}{2}\right)|-\rangle \right\} \right|^2 \\ &= \frac{1}{2} \left| \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right) \pm \exp\left(\frac{+i\omega t}{2}\right) \right|^2. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Lembrando da relação de Euler que diz:

$$\cos x = \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2} \quad (\text{A.20})$$

$$\text{sen} x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i} \quad (\text{A.21})$$

obtemos para S_x+ ,

$$\text{Prob. } S_x+ = \cos^2 \frac{\omega t}{2} \quad (\text{A.22})$$

e para S_x- temos,

$$\text{Prob. } S_x- = \text{sen}^2 \frac{\omega t}{2} \quad (\text{A.23})$$

Contudo o spin se encontra inicialmente na direção x positivo, como o campo magnético esta na direção z isso o faz girar, como consequência desse giro, obtemos uma probabilidade

finita de achar S_z — para um t futuro. A soma das probabilidades é 1 para qualquer t , como podemos verificar, o que condiz com a unitariedade do operador evolução temporal [9].

Agora estamos interessados em determinar os valores esperados de S_x, S_y e S_z . Vamos começar com S_x

$$\langle S_x \rangle = \langle \alpha, t | S_x | \alpha, t \rangle \quad (\text{A.24})$$

onde $S_x = \frac{\hbar}{2} (|+\rangle \langle -| + |- \rangle \langle +|)$, então

$$\langle S_x \rangle = \langle \alpha, t | \frac{\hbar}{2} (|+\rangle \langle -| + |- \rangle \langle +|) | \alpha, t \rangle \quad (\text{A.25})$$

Desenvolvendo a equação (A.25), obtemos que

$$\langle S_x \rangle = \left(\frac{\hbar}{2} \right) \cos(\omega t) \quad (\text{A.26})$$

A equação (A.26) nos diz que toda vez que formos medir o valor esperado de S_x no tempo vamos encontrar valores diferentes.

Agora para calcular o S_y vamos usar o mesmo procedimento, onde

$$S_y = \frac{\hbar}{2} (-i|+\rangle \langle -| + i|- \rangle \langle +|) \quad (\text{A.27})$$

Então,

$$\langle S_y \rangle = \langle \alpha, t | S_y | \alpha, t \rangle \quad (\text{A.28})$$

$$\langle S_y \rangle = \langle \alpha, t | \frac{\hbar}{2} (-i|+\rangle \langle -| + i|- \rangle \langle +|) | \alpha, t \rangle \quad (\text{A.29})$$

Desenvolvendo a equação (A.29) chegamos a

$$\langle S_y \rangle = \left(\frac{\hbar}{2} \right) \text{sen}(\omega t) \quad (\text{A.30})$$

A interpretação feita na equação (A.26) vale para a equação (A.30). Pois, o S_x e S_y não comutam com o hamiltoniano do sistema, isso acontece porque o hamiltoniano do sistema depende do eixo z . E por definição o S_x, S_y e S_z não comutam. Agora vamos determinar o S_z , sendo que

$$S_z = \frac{\hbar}{2} (|+\rangle \langle +| - |- \rangle \langle -|) \quad (\text{A.31})$$

$$\begin{aligned} \langle S_z \rangle &= \langle \alpha, t | S_z | \alpha, t \rangle \\ &= \langle \alpha, t | \frac{\hbar}{2} (|+\rangle \langle +| - |- \rangle \langle -|) | \alpha, t \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

logo,

$$\langle S_z \rangle = 0 \tag{A.33}$$

O resultado anterior quer dizer que o hamiltoniano H comuta com S_z .