I

§ Problema: Calcular a Relação de Incerteza entre S_x e S_y para o estado $|+\rangle$

O estado $|+\rangle$ é representado por $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Usamos a representação de Pauli para os operadores S_x e S_y

$$S_x \doteq \frac{\hbar}{2}\sigma_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$S_y \doteq \frac{\hbar}{2}\sigma_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Resulta imediatamente que

$$S_x^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \sigma_x^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2, \quad S_y^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \sigma_y^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2$$

Temos também a relação de comutação:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z.$$

Os valores médios são nulos:

Lembrar Stern-Gerlach

$$\langle S_x \rangle_{|+\rangle} = \frac{\hbar}{2}\cdot\left(\frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar}{2}\left(\frac{1}{2}\right) = 0.$$

$$\langle S_y \rangle_{|+\rangle} = \frac{\hbar}{2}\cdot\left(\frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar}{2}\cdot\left(\frac{1}{2}\right) = 0.$$

Por tanto

$$(\Delta S_x)^2 = S_x^2 = \frac{\hbar^2}{4},$$

$$(\Delta S_y)^2 = S_y^2 = \frac{\hbar^2}{4}.$$

Obtemos então (forma exata):

$$\left\langle (\Delta S_x)^2 \right\rangle_{|+\rangle} \left\langle (\Delta S_y)^2 \right\rangle_{|+\rangle} = \left(\frac{\hbar^2}{4}\right)^2.$$

Calculamos agora o lado direito da desigualdade:

$$\frac{1}{4}\left| \left\langle [S_x, S_y] \right\rangle_{|+\rangle} \right|^2 = \frac{1}{4}\left| \langle +| i\hbar S_z |+\rangle \right|^2$$

$$= \frac{1}{4}\left| i\hbar \cdot \frac{\hbar}{2} \right|^2 = \frac{1}{4}\left(\frac{\hbar^2}{4}\right)^2 = \left(\frac{\hbar^2}{4}\right)^2$$

De maneira, que neste caso temos a igualdade:

$$\left\langle (\Delta S_x)^2 \right\rangle_{|+\rangle} \left\langle (\Delta S_y)^2 \right\rangle_{|+\rangle} = \frac{1}{4}\left| \left\langle [S_x, S_y] \right\rangle_{|+\rangle} \right|^2$$

$$= \left(\frac{\hbar^2}{4}\right)^2,$$

que é conseqüência de $\{S_x, S_y\} = 0$.

§ Mudança da Base

Sejam dois conjuntos ortonormais completos:

$$\{|a'\rangle\}\,, \quad \{|b'\rangle\} \quad .$$

Assim temos

$$\begin{aligned} &\langle a'|a''\rangle = \delta_{a',a''} \\ &\langle b'|b''\rangle = \delta_{b',b''} \\ &1 = \textstyle\sum_{a'}\ |a'\,\rangle\langle\,a'| = \sum_{b'}\ |b'\,\rangle\langle\,b'| \end{aligned}$$

§Def: Operador Unitário U

$$U^\dagger \cdot U = U \cdot U^\dagger = 1 \implies U^{-1} = U^\dagger$$

Theorem 1. *Sempre existe um operador unitário que transforma a base, isto é um operador U tal que*

$$\left|b^{(j)}\right\rangle = U\left|a^{(j)}\right\rangle \ , \ j = 1, 2, ..., N.$$

Dem. Por construção o operador abaixo faz a mudança da base

$$U = \sum_k \ \left|b^{(k)}\,\right\rangle\left\langle\,a^{(k)}\right| .$$

Em efeito,

$$U\left|a^{(j)}\right\rangle = \sum_k \ \left|b^{(k)}\right\rangle\left\langle a^{(k)}|a^{(j)}\right\rangle = \left|b^{(j)}\right\rangle \ , \ j = 1, 2, ..., N.$$

Mostremos que U é unitário:

$$\begin{aligned} &U^\dagger = \textstyle\sum_k \ \left|a^{(k)}\,\right\rangle\left\langle\,b^{(k)}\right| \ , \\ &U^\dagger \cdot U = \textstyle\sum_{k,k'} |\ a^{(k)}\,\rangle\langle\,b^{(k)}\ \left|b^{(k')}\,\right\rangle\left\langle\,a^{(k')}\right| = \\ &= \textstyle\sum_{k,k'} |\ a^{(k)} > \delta_{k,k'} < a^{(k')}| = \sum_{a'}\ |a'\,\rangle\langle\,a'| = 1 \ . \qquad c.q.d. \quad \square \end{aligned}$$

Em outras palavras, isto é uma consequência trivial do desenvolvimento:

$$|b'\rangle = \sum_{a'} \ |a'\rangle\,\langle a'|b'\rangle \ \ .$$

Calculamos agora a representação matricial de U em relação à base $\{|a'\rangle\}$. Temos o resultado

$$\begin{array}{l} \left\langle a^{(k)} \left| U \right| a^{(j)} \right\rangle = \sum_i \left\langle a^{(k)} | b^{(i)} \right\rangle \left\langle a^{(i)} | a^{(j)} \right\rangle = \\ = \sum_i \left\langle a^{(k)} | b^{(i)} \right\rangle \delta_{ij} = \left\langle a^{(k)} | b^{(j)} \right\rangle \ . \end{array}$$

Os elementos de matriz de U na base $\{|a'\rangle\}$ são construídos pelos *produtos internos* entre as duas bases.

§. Transformação de coordenadas

Seja $|\alpha>$ um ket arbitrário. Ele pode ser expandido em relação a qualquer uma das bases:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle = \sum_{b'} |b'\rangle \langle b'|\alpha\ \rangle \ .$$

Procuramos a equação de transformação dos coeficientes. Primeiro notamos que

$$\left\langle a^{(j)} \left| U^\dagger \right| a^{(k)} \right\rangle = \left\langle a^{(k)} | b^{(j)} \right\rangle^* = \left\langle b^{(j)} | a^{(k)} \right\rangle \ ,$$

e portanto temos

$$\begin{array}{l} \left\langle b^{(k)} | \alpha \right\rangle = \sum_i \left\langle b^{(k)} | a^{(i)} \right\rangle \left\langle a^{(i)} | \alpha \right\rangle = \\ = \sum_i \left\langle a^{(k)} \left| U^\dagger \right| a^{(i)} \right\rangle \left\langle a^{(i)} | \alpha \right\rangle \ . \end{array} \tag{0.1}$$

A equação acima (0.1) pode ser representada em notação matricial

$$\begin{pmatrix} \left\langle b^{(1)}|\alpha \right\rangle \\ . \\ . \\ . \\ \left\langle b^{(N)}|\alpha \right\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^\dagger_{11} & . & . & . & U^\dagger_{1N} \\ . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ U^\dagger_{N1} & . & . & . & U^\dagger_{NN} \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} \left\langle a^{(1)}|\alpha \right\rangle \\ . \\ . \\ . \\ \left\langle a^{(N)}|\alpha \right\rangle \end{pmatrix} \quad .$$

As novas 'coordenadas ' de $|\alpha>$ são obtidas a partir das velhas através de $U^\dagger$. Em contrapartida, a mudança da base é dada por U:

$$\left| b^{(j)} \right\rangle = U \left| a^{(j)} \right\rangle \ , \ j = 1, 2, ..., N.$$

§. Transformação dos elementos de matriz

Seja a matriz de um operador arbitrário X. Calculemos os elementos de matriz em relação à *nova base*:

$$\bar{X}_{kl} = \left\langle b^{(k)} \left| X \right| b^{(l)} \right\rangle = \sum_{m,n} \left\langle b^{(k)} | a^{(m)} \right\rangle \left\langle a^{(m)} | X | a^{(n)} \right\rangle \left\langle a^{(n)} | b^{(l)} \right\rangle =$$

$$= \sum_{m,n} U^{\dagger}_{km} \quad X_{mn} \quad U_{mn} \quad .$$

Em termos de matrizes, isto pode ser representado por:

$$\boxed{\bar{X} = U^{\dagger} \circ X \circ U = U^{-1} \circ X \circ U \qquad .}$$

Esta é chamada de **Transformação de Semelhança.**

§. Def: Traço de um operador $Tr\ X$

$$\boxed{Tr\ X \equiv \sum_{a'} \left\langle a' \left| X \right| a' \right\rangle \qquad .}$$

Theorem 2. *O traço de um operador é uma propriedade independente da base.*

Sem demostração (exercício):

$$Tr'\ X = \sum_{b'} \left\langle b' \left| X \right| b' \right\rangle = \sum_{a'} \left\langle a' \left| X \right| a' \right\rangle \qquad \text{c.q.d.} \qquad \square$$

§. Propriedades do traço

Seja U um operador unitário. Temos as propriedades:

$$\begin{aligned}
&Tr\,(X \circ Y) = Tr\,(Y \circ X) \\
&Tr\,\left(U^{\dagger} \circ X \circ U\right) = Tr\,(U) \\
&Tr\,(|a'\rangle\langle a''|) = \delta_{a',a''} \\
&Tr\,(|a'\rangle\langle b'|) = \langle a' | b' \rangle
\end{aligned}$$

§. Diagonalização de Operadores

Theorem 3. *Assumamos que temos um observável B, cujos elementos de matriz em relação à base $\{|a'>\}$são todos conhecidos. Os dois problemas seguintes* ***são equivalentes****:*

i) Diagonalizar a matriz de B na base $\{|a'>\}$;

ii) Encontrar a matriz unitária U que fornece a mudança da base

$$\{|a'\rangle\} \rightarrow \{|b'\rangle\}$$

onde a matriz de B é diagonal.

Dem. De fato, estamos interessados em obter os autovalores b' e os autokets $|b'>$ de B, isto é

$$B\,|b'\rangle = b'\,|b'\rangle \qquad .$$

Projetando esta equação sobre a base $\{|a'>\}$ obtemos

$$b'\,\langle a''|b'\rangle = \langle a''\,|B|\,b'\rangle = \sum_{a'}\;\langle a''\,|B|\,a'\rangle\,\langle a'|b'\rangle$$

e identificando $\langle a'|b'\rangle$ como os coeficientes lineares dos autovetores em relação à base $\{|a'\rangle\}$, a equação acima escreve-se na forma matricial como:

$$\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & . & . & B_{1N} \\ B_{21} & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ B_{N1} & . & . & . & B_{NN} \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} c_1^{(l)} \\ . \\ . \\ . \\ c_N^{(l)} \end{pmatrix} = b^{(l)} \begin{pmatrix} c_1^{(l)} \\ . \\ . \\ . \\ c_N^{(l)} \end{pmatrix} \quad . \tag{0.2}$$

Soluções não triviais para os coeficientes $\{c_i^{(l)}\}$ são possíveis quando é satisfeita a equação caraterística

$$\boxed{\det\left(B - \lambda\cdot\mathbf{1}\right) = 0}$$

para os autovalores $\{\lambda\}$. Uma matriz hermiteana tem exatamente N autovalores **reais** que são identificados com os $\{b'\}$ que queriamos determinar originalmente. Uma vez conhecidos os autovalores $\{b^{(l)}\}$, podemos resolver o sistema linear (0.2) para os coeficientes

$$c_i^{(k)} = \left\langle a^{(i)} | b^{(k)} \right\rangle \ ,$$

exceto por uma constante de **normalização** (lembremos que o sistema linear homogêneo (0.2) tem infinitas soluções). Mas obter estes coeficientes é equivalente a encontrar os elementos da matriz unitária U que da atransformção da base $\{|a'\rangle\} \to \{|b'\rangle\}$.

c.q.d. □

§. Def: Operadores equivalentes por unitaridade

Dois observáveis A e B são 'equivalentes ' quando existe uma transformação unitária U tal que

$$\boxed{B = U \circ A \circ U^\dagger \ .}$$

Theorem 4. *A e B têm espectros idênticos.*

Dem. Seja a equação de autovalores

$$A \left| a^{(l)} \right\rangle = a^{(l)} \left| a^{(l)} \right\rangle \ ,$$

e operando com U pela esquerda temos

$$U \cdot A \left| a^{(l)} \right\rangle = U \cdot A \cdot \mathbf{1} \left| a^{(l)} \right\rangle = U \cdot A \cdot U^\dagger \cdot U \left| a^{(l)} \right\rangle = a^{(l)} U \left| a^{(l)} \right\rangle$$

e escrevendo $B = U \cdot A \cdot U^\dagger$, obtemos

$$B \left(U \left| a^{(l)} \right\rangle \right) = a^{(l)} U \left| a^{(l)} \right\rangle \ .$$

Escrevendo de maneira explícita a nova base

$$\left| b^{(j)} \right\rangle = U \left| a^{(j)} \right\rangle \ , \ j = 1, 2, ..., N,$$

temos

$$B \left| b^{(l)} \right\rangle = b^{(l)} \left| b^{(l)} \right\rangle \ ,$$
$$b^{(l)} = a^{(l)} \ .$$

Como existem infinitas transformações unitárias , este operador $B = U \cdot A \cdot U^\dagger$ não é considerado como fundamentalmente **diferente** de A. *c.q.d.* □

$$\boxed{|b^{(j)}\rangle = U|a^{(j)}\rangle}$$

$$|a^{(j)}\rangle = U^\dagger |b^{(j)}\rangle$$

$$U_{ij} = \langle a^{(i)}|U|a^{(j)}\rangle = \langle a^{(i)}|b^{(j)}\rangle$$

$$\tilde{U}^\dagger_{ij} = \langle b^{(i)}|U^\dagger|b^{(j)}\rangle = \langle b^{(i)}|a^{(i)}_j\rangle$$

$$U = \sum_k |b^{(k)}\rangle\langle a^{(k)}|$$

$$U^\dagger = \sum_k |a^{(k)}\rangle\langle b^{(k)}|$$

$$|\alpha\rangle = \sum_j |a^{(j)}\rangle\langle a^{(j)}|\alpha\rangle = \sum_k |b^{(k)}\rangle\langle b^{(k)}|\alpha\rangle$$

$$\boxed{\langle b^{(k)}|\alpha\rangle = \sum_j \langle b^{(k)}|U^\dagger|b^{(j)}\rangle \times \langle a^{(j)}|\alpha\rangle}$$

Ex. Diagonalização de $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$

Autovalores:

$$0 = \det \begin{pmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1$$

a) $\lambda = +1$

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = (+1)\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

obtemos $\qquad B = iA$

normalização: $\qquad |A|^2 + |B|^2 = 2|A|^2 = 1$

Convenção: $\qquad A = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad , \quad B = \frac{i}{\sqrt{2}}$

Obtemos o autoket $|S_y;+\rangle$ de S_y:

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

onde $(|+\rangle, |-\rangle)$ é a base do spin quantizado segundo o eixo 'z'.

$$|S_y;+\rangle \doteq \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \qquad (1)$$

b) $\lambda = -1 \quad \Rightarrow \quad B = -iA$

Resultado: $A = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $B = -\frac{i}{\sqrt{2}}$

daí:

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

ou

$$|S_y;-\rangle \doteq \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \qquad (2)$$

De (1) + (2), obtemos a matriz unitária da mudança da base

$$\mathcal{U} \doteq \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{-i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} ,$$

verificando que

$$\mathcal{U}|+\rangle = |S_y;+\rangle , \quad \mathcal{U}|-\rangle = |S_y;-\rangle$$

Note que

$$S_y(\mathcal{U}|+\rangle) = S_y|S_y;+\rangle = \frac{\hbar}{2}|S_y;+\rangle$$

tbm temos $\mathcal{U}^\dagger|S_y;+\rangle = |+\rangle$, de modo que

$$(\mathcal{U}^\dagger S_y \mathcal{U})|+\rangle = \frac{\hbar}{2}(\mathcal{U}^\dagger|S_y;+\rangle) =$$

$$= \frac{\hbar}{2}|+\rangle,$$

obtendo :

$$\mathcal{U}^\dagger S_y \mathcal{U} = S_z \Leftrightarrow S_y = \mathcal{U} S_z \mathcal{U}^\dagger$$

Falamos que os observáveis (S_y, S_z) são equivalentes por unitaridade. Para as matrizes:

$$\mathcal{U}^\dagger S_y \mathcal{U} \doteq \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-i}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$