

§ A Medida na Teoria Quântica

M1

Temos um sistema físico e um observável A , caracterizado por um operador A .

P.A.M. Dirac (1958):

"A measurement always causes the system to jump into an eigenstate of the dynamical variable that is being measured"

Seja $\{|a'\rangle\}$ o conjunto de autoestados de A . Antes que a medição de A seja feita, assumimos que o sistema físico é representado por uma combinação linear

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

$$c_{a'} = \langle a'|\alpha\rangle$$

Quando a medição de A é realizada, o sistema passa bruscamente para um dos autoestados $|a'\rangle$ de A . Este processo é chamado às vezes "colapso da função estado".

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

- ▶ A medição, geralmente, muda o estado, $|\alpha\rangle \rightarrow |a'\rangle$, e o valor medido de A é a' . Os possíveis valores de uma medição de A são então seus autovalores $\{a'\}$.

- ▶ Não é possível prever de antemão qual dos valores de $\{a'\}$ será obtido no processo de medição (exceto no caso em que $|\alpha\rangle \equiv |a'\rangle$, em cujo caso o valor obtido é a' com certeza)

- ▶ Postulado. Assumamos que o estado $|\alpha\rangle$ está normalizado: $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$. Postulamos que a probabilidade de "saltar" para um particular autoestado de A, digamos $|a'\rangle$, é

$$P_{a'} \equiv |\langle a'|\alpha\rangle|^2$$

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle \Rightarrow \langle\alpha|\alpha\rangle = \sum_{a'} \langle\alpha|a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle \\ &= \sum_{a'} |\langle a'|\alpha\rangle|^2 = \sum_{a'} P_{a'} = 1 \end{aligned}$$

- ▶ Ensemble. Apesar de falarmos de um sistema físico simples, empiricamente, para determinar a probabilidade acima devemos considerar um número grande de medições realizadas sobre um ensemble, isto é uma coleção de sistemas físicos preparados de maneira idêntica, todos eles caracterizados pelo mesmo ket $|\alpha\rangle$. Um ensemble deste tipo é chamado ensemble puro

Uma vez que o estado colapsou para $|a'\rangle$, outra medição posterior, realizada imediatamente, dará o resultado

a' com certeza. Por outro lado, a probabilidade de que o sistema, inicialmente caracterizado por $|a'\rangle$, salte para o autoestado $|a''\rangle$, com $a' \neq a''$, é nula porque os autoestados correspondentes são ortogonais.

Obs. As probabilidades assim definidas satisfazem requisitos gerais da teoria de probabilidades:

$$a) P_{a'} = |\langle a' | \alpha \rangle|^2 \geq 0$$

$$b) \sum_{a'} P_{a'} = \sum_{a'} |\langle a' | \alpha \rangle|^2 = 1$$

► Valor médio (esperado). O valor médio $\langle A \rangle$ de um observável A em relação ao estado $|\alpha\rangle$ é definido como:

$$\langle A \rangle_{\alpha} \equiv \langle \alpha | A | \alpha \rangle$$

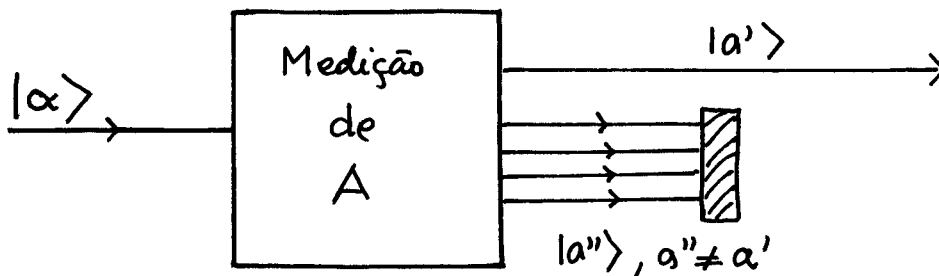
$$\langle A \rangle = \sum_{a', a''} \langle \alpha | a' \rangle \underbrace{\langle a' | A | a'' \rangle}_{a'' \delta_{a'' a'}} \langle a'' | \alpha \rangle$$

$$= \sum_{a'} a' |\langle a' | \alpha \rangle|^2 = \sum_{a'} a' P_{a'}$$

A definição concorda com nossa noção intuitiva de valor médio.

► Medição seletiva ou filtração (Generalização da experiência de Stern - Gerlach)

Imaginamos um aparelho que seleciona apenas um dos autoestados de A , por exemplo $|a'\rangle$, e rejeita todos os outros (são absorvidos ou bloqueados)



O efeito de uma medição deste tipo pode ser representado através de um operador de projeção

$$\Lambda_{a'} \equiv |a'\rangle\langle a'|$$

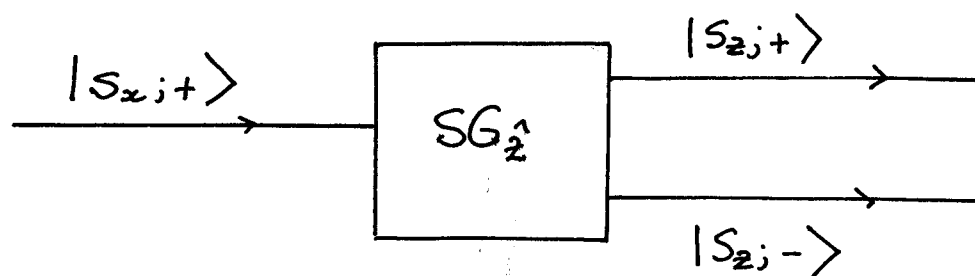
$$\Lambda_{a'} |\alpha\rangle = |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle$$

Exemplo: Sistema de spin $\frac{1}{2}$ outra vez

Usamos os postulados da MQ para determinar os operadores (S_x, S_y) junto com seus autoestados $|S_x; \pm\rangle, |S_y; \pm\rangle$.

Lembramos que um feixe de partículas com $(S_x +)$, quando submetido a um aparelho $SG \hat{z}$, é separado em duas componentes de igual intensidade (mesmo número de

partículas).



Isso significa que a partícula aparece com igual probabilidade em qualquer um dos estados disponíveis:

$$|\langle S_{z;+} | S_{x;+} \rangle|^2 = |\langle S_{z;-} | S_{x;+} \rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

ou $|\langle S_{z;+} | S_{x;+} \rangle| = |\langle S_{z;-} | S_{x;+} \rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

Construímos portanto o ket:

$$|S_{x;+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_1} |-\rangle,$$

onde usamos $(|+\rangle, |-\rangle)$ para os autoestados de S_z . Temos eliminado uma fase global no estado (sem consequências físicas), e escolhido o coeficiente de $|+\rangle$ como positivo por convenção. Outro ket $|S_{x;-}\rangle$ deve ser ortogonal ao primeiro pois ambos representam estados mutuamente excludentes:

$$|S_{x;-}\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle$$

M6

$$\langle S_{xj+} | S_{xj-} \rangle = \frac{c_+}{\sqrt{2}} + \frac{c_- e^{-i\delta_1}}{\sqrt{2}} = 0$$

e a normalização $|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$

$$c_- = -c_+ e^{i\delta_1}$$

$$1 = |c_+|^2 + |c_+|^2 = 2|c_+|^2 \Rightarrow |c_+| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Outra vez, por convenção, se escolhe $c_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}$, e assim temos:

$$|S_{xj-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle - \frac{e^{i\delta_1}}{\sqrt{2}} |-\rangle$$

Os autovalores de S_x são $\pm \hbar/2$. Assim, sua representação espectral é

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

que pode ser representado também na base $(|+\rangle, |-\rangle)$ de S_z :

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{\hbar}{2} \left[\left(\frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_1} |-\rangle \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \langle +| + \frac{e^{-i\delta_1}}{\sqrt{2}} \langle -| \right) - \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle - \frac{e^{i\delta_1}}{\sqrt{2}} |-\rangle \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \langle +| - \frac{e^{-i\delta_1}}{\sqrt{2}} \langle -| \right) \right] \\ &= \frac{\hbar}{2} \left\{ \cancel{\frac{1}{2} |+\rangle \langle +|} + \cancel{\frac{1}{2} |-\rangle \langle -|} + \frac{e^{-i\delta_1}}{2} |+\rangle \langle -| + \frac{e^{i\delta_1}}{2} |-\rangle \langle +| - \right. \\ &\quad \left. - \frac{e^{-i\delta_1}}{2} |+\rangle \langle -| - \frac{e^{i\delta_1}}{2} |-\rangle \langle +| \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & - \left. \frac{1}{2} |+\rangle \langle +| - \frac{1}{2} |-\rangle \langle -| + \frac{e^{i\delta_1}}{2} |-\rangle \langle +| + \frac{e^{-i\delta_1}}{2} |+\rangle \langle -| \right\} \\
 & = \frac{\hbar}{2} \left(e^{-i\delta_1} |+\rangle \langle -| + e^{i\delta_1} |-\rangle \langle +| \right) = S_x
 \end{aligned}$$

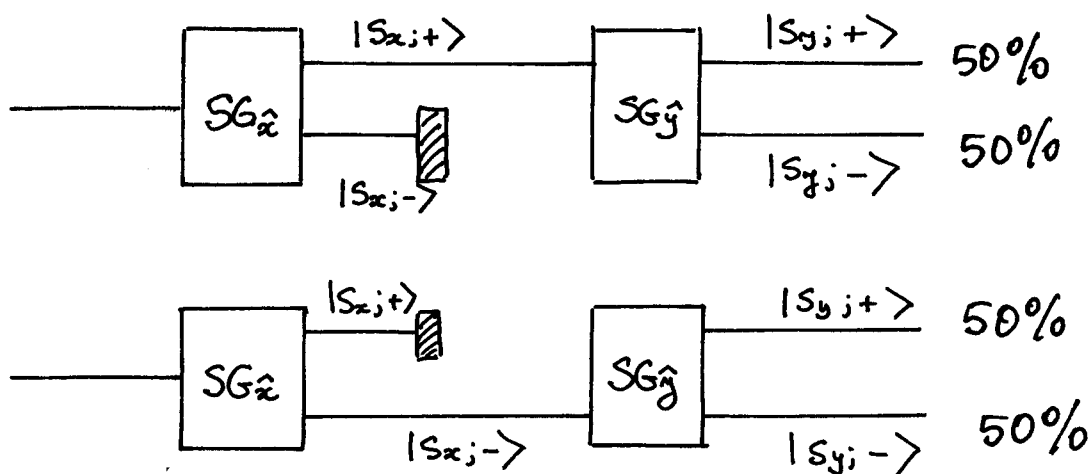
que representa um operador hermiteano (como deve ser!).

Por simetria, os mesmos argumentos usados com S_x , poderiam ser usados para S_y . Assim escrevemos:

$$|S_{y;\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle \pm \frac{e^{i\delta_2}}{\sqrt{2}} |-\rangle$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \left(e^{-i\delta_2} |+\rangle \langle -| + e^{i\delta_2} |-\rangle \langle +| \right)$$

- Tarefa: determinar δ_1 e δ_2 . Temos informação adicional a partir de uma experiência com sucessivos aparelhos de $S-G_{\hat{x}}$ e $S-G_{\hat{y}}$, com resultados



O que mostra que

$$|\langle S_{y_j \pm} | S_{x_j +} \rangle| = |\langle S_{y_j \pm} | S_{x_j -} \rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Este resultado expressa nada mais que a simetria de rotação (não temos direção privilegiada no espaço). Assim temos:

$$\begin{aligned} \langle S_{y_j \pm} | S_{x_j +} \rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \langle + | \pm \frac{e^{-i\delta_2}}{\sqrt{2}} \langle - | \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} | + \rangle + \frac{e^{i\delta_1}}{\sqrt{2}} | - \rangle \right) \\ &= \left(\frac{1}{2} \pm \frac{e^{i(\delta_1 - \delta_2)}}{2} \right) \end{aligned}$$

e portanto:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} &= |\langle S_{y_j \pm} | S_{x_j +} \rangle| = \left| \frac{1}{2} \pm \frac{e^{i(\delta_1 - \delta_2)}}{2} \right| \\ &= \frac{1}{2} \left| 1 \pm \cos(\delta_1 - \delta_2) \pm i \sin(\delta_1 - \delta_2) \right|, \end{aligned}$$

que para os quadrados fornece

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} &= \frac{1}{4} \left[(1 \pm \cos(\delta_1 - \delta_2))^2 + \sin^2(\delta_1 - \delta_2) \right] \\ &= \frac{1}{4} \left[2 \pm 2 \cos(\delta_1 - \delta_2) \right] = \frac{1}{2} \left[1 \pm \cos(\delta_1 - \delta_2) \right] \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \cos(\delta_1 - \delta_2) = 0 \quad \text{Solução:} \quad \delta_1 - \delta_2 = \pm \frac{\pi}{2}$$

Segue deste resultado que os elementos de matriz de S_x e S_y não podem ser todos reais. Se escolhermos os de S_x como

sendo reais, então os de S_y são puramente imaginários (e vice-versa), mostrando a necessidade de introduzir números complexos. É conveniente escolher os elementos de matriz de S_x como sendo reais com $\delta_1 = 0$ (poderia também ser $\delta_1 = \pi$?). Para o segundo ângulo de fase temos $\delta_2 = \pm \frac{\pi}{2}$. Para um sistema direito $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ a escolha correta é

$$\delta_1 = 0, \quad \delta_2 = \frac{\pi}{2}$$

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

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

Identificando os estados $(|+\rangle, |-\rangle)$ com a base natural $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, podemos dar uma representação matricial dos operadores. Para S_z temos:

$$S_z = \frac{\hbar}{2} (|+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -|) \leftrightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$S_x \leftrightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y \leftrightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Para os autoestados obtemos

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

$$\boxed{|S_{y,j;\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle},$$

Com a representação matricial:

$$|S_{x,j;\pm}\rangle \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$$

$$|S_{y,j;\pm}\rangle \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}$$

► Operadores escadas. Podemos definir operadores que trocam o spin:

$$S_+ \equiv \hbar |+\rangle\langle -|, \quad S_- \equiv \hbar |-\rangle\langle +|,$$

com representações matriciais

$$S_+ \leftrightarrow \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- \leftrightarrow \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_+ |+\rangle = \hbar |+\rangle\langle -|+\rangle = 0$$

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

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

$$\langle +|S_+|-\rangle = \hbar \quad \langle -|S_+|-\rangle = 0$$

Para o outro operador temos:

$$S_- |+\rangle = \hbar |-\rangle, \quad S_- |-\rangle = 0$$

Temos a identidade:

$$S_{\pm} = S_x \pm i S_y$$

As relações de comutação (ou anti-comutação) podem ser exploradas usando a representação matricial. No caso das componentes (S_x, S_y) temos

$$S_x S_y = i \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad S_y S_x = -i \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$S_x S_y = i \frac{\hbar}{2} S_z \quad S_y S_x = -i \frac{\hbar}{2} S_z$$

► Def: Comutador de dois operadores A, B

$$[A, B] \equiv AB - BA$$

► Def: Anti-comutador de A, B

$$\{A, B\} \equiv AB + BA$$

No caso particular dos operadores (S_x, S_y) temos:

$$[S_x, S_y] = i \hbar S_z, \quad \{S_x, S_y\} = 0$$

Como

$$S_z^2 = S_x^2 = S_y^2 = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} \cdot 1,$$

as relações de comutação (anti-comutação) podem ser

escritas de maneira compacta:

$$[S_i, S_j] = i \epsilon_{ijk} \hbar S_k, \quad i, j, k = x, y, z$$

e

$$\{S_i, S_j\} = \frac{\hbar^2}{2} \delta_{ij}$$

Costuma-se também definir o operador "quadrado do spin total":

$$\vec{S}^2 = \vec{S} \cdot \vec{S} \equiv S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$$

$$= \frac{3}{4} \hbar^2 \cdot 1 \leftrightarrow \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Este operador é uma constante e portanto comuta com outros operadores. Em particular temos:

$$[S^2, S_j] = 0, \quad j = x, y, z$$

Operadores compatíveis

- Def. Dois observáveis A e B , representados por operadores (A, B) , são definidos como sendo compatíveis quando

$$[A, B] = 0 \quad ;$$

e não-compatíveis quando

$$[A, B] \neq 0$$

Exemplo. Para spin $\frac{1}{2}$, S^2 e qualquer componente S_j são operadores compatíveis. Em contrapartida, as diferentes componentes do spin, (S_x, S_y, S_z) não são compatíveis.

► Teorema. Assumamos que A e B são observáveis compatíveis, e que os autovalores de A são não-degenerados. Então os elementos de matriz $\langle a'' | B | a' \rangle$ são todos diagonais

Dem. Para observáveis compatíveis $[A, B] = 0$. Assim:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle a'' | [A, B] | a' \rangle = \langle a'' | (AB - BA) | a' \rangle \\ &= (a'' - a') \langle a'' | B | a' \rangle \end{aligned}$$

ou
$$0 = (a'' - a') \langle a'' | B | a' \rangle,$$

e para $a' \neq a'' \Rightarrow \langle a'' | B | a' \rangle = 0$. Escrevemos então

$$\langle a'' | B | a' \rangle = \delta_{a'' a'} \langle a' | B | a' \rangle$$

Desta maneira, tanto A como B tem representação diagonal na base $\{|a'\rangle\}$

$$A = \sum_{a'} a' |a'\rangle \langle a'|$$

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

Operemos com B sobre um ket $|a'\rangle$:

$$\begin{aligned} B|a'\rangle &= \sum_{a''} |a''\rangle \langle a''|B|a'\rangle \underbrace{\langle a''|a'\rangle}_{\delta_{a''a'}} \\ &= \langle a'|B|a'\rangle |a'\rangle, \end{aligned}$$

de maneira que $|a'\rangle$ é auto-ket de B com autovalor

$$b' = \langle a'|B|a'\rangle$$

Resultado: O ket $|a'\rangle$ é auto-ket simultâneo dos observáveis A e B , com autovalores a' e $b' = \langle a'|B|a'\rangle$ respectivamente. Assim, para tratar A e B de maneira equivalente, escrevemos o ket como $|a', b'\rangle$, tal que

$$\begin{aligned} A|a', b'\rangle &= a'|a', b'\rangle \\ B|a', b'\rangle &= b'|a', b'\rangle \end{aligned}$$

Que acontece no caso de espectro degenerado? Assumimos degenerescência de ordem α :

$$\begin{aligned} A|a^{(i)}\rangle &= a'|a^{(i)}\rangle, \quad i=1, 2, \dots, \alpha \\ \langle a^{(i)}|a^{(j)}\rangle &= \delta_{ij} \end{aligned}$$

Para kets fora do espaço de degenerescência o teorema

continua válido. No espaço de degenerescência M15
não mostramos nada porque:

$$0 = \langle a^{(i)} | [A, B] | a^{(j)} \rangle = (a^2 - a') \langle a^{(i)} | B | a^{(j)} \rangle,$$

que é uma identidade. Mas como B é um operador hermitiano

$$\langle a^{(i)} | B | a^{(j)} \rangle = \langle a^{(j)} | B | a^{(i)} \rangle^*$$

e a matriz de B no subespaço de degenerescência sempre pode ser diagonalizada através de combinações lineares convenientes de $\{|a^{(i)}\rangle\}$:

$$|b'\rangle = \sum_{i=1, \dots, n} c_i |a^{(i)}\rangle$$

com $B|b'\rangle = b'|b'\rangle$. Notamos que $|b'\rangle$ é também auto-ket de A com $A|b'\rangle = a'|b'\rangle$.

Em geral os autovalores de B referidos ao subespaço $\{|a^{(i)}\rangle\}$ são diferentes, de maneira que a notação $|a', b'\rangle$ não é supérflua.

Medição de Operadores Compatíveis.

Medimos primeiro A e obtemos o resultado a' . Depois medimos B e obtemos o resultado b' . Finalmente medimos A de novo. Segue da discussão anterior, que o resultado será a' com certeza (probabilidade 1). A medição de B , neste caso, não destrói a informação

obtida na primeira medida de A ,

$$|a\rangle \xrightarrow[A]{\text{med. de}} |a', b'\rangle \xrightarrow[B]{\text{med. de}} |a', b'\rangle \xrightarrow[A]{\text{med. de}} |a', b'\rangle,$$

quer dizer que podemos dar valores simultâneos para os observáveis A e B .

Este argumento continua válido na presença de degenerescência. Na primeira medição que fornece o resultado a' , o estado passa para um ket do tipo

$$\sum_{i=1,2,\dots,n} c_a^{(i)} |a', b^{(i)}\rangle,$$

onde n é a ordem de degenerescência. A posterior medição de B faz saltar o estado para uma particular componente

$$|a', b^{(i)}\rangle$$

Finalmente, a medição de A dará o valor $\underline{a'}$ com certeza. Às vezes é usado um índice coletivo K' em lugar dos conjuntos de índices (a', b')

$$|K'\rangle = |a' b'\rangle$$

Este argumento pode ser generalizado para vários observáveis mutuamente compatíveis:

$$[A, B] = [B, C] = [A, C] = \dots = 0$$

Assumimos que temos encontrado um conjunto maximal de observáveis que comutam (não triviais), de maneira que nenhum outro pode ser adicionado à lista acima.

Os autovalores de um operador individual podem ser degenerados, mas fornecendo a lista completa dos autovalores de A, B, C, \dots , isto é (a', b', c', \dots) , determinamos univocamente os autokets:

$$|K'\rangle = |a' b' c' \dots\rangle$$

Ortonormalidade:

$$\langle K'' | K' \rangle = \delta_{K' K''} = \delta_{a'' a'} \delta_{b'' b'} \delta_{c'' c'} \dots,$$

e a relação de completeza se expressa por

$$\begin{aligned} \sum_{K'} |K'\rangle \langle K'| &= \sum_{a'} \sum_{b'} \sum_{c'} \dots |a' b' c' \dots\rangle \langle a' b' c' \dots| \\ &= 1 \end{aligned}$$