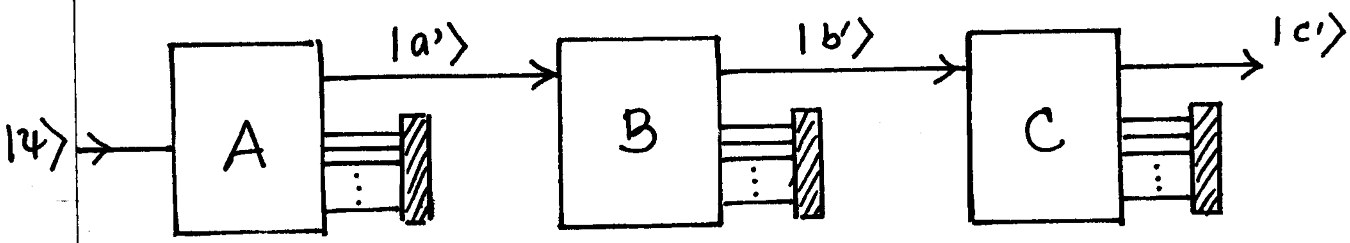
Observáveis não compatíveis

Para observáveis não compatíveis, os correspondentes operadores não comutam. Portanto eles não possuem um conjunto completo de auto-estados simultâneos. De fato, assumamos o contrário. Seja então $\{|a'b'\rangle\}$ um conjunto completo que diagonaliza A e B:

$$AB|a'b'\rangle = b'\left(A|a'b'\rangle\right) = a'b'\,|a'b'\rangle$$
$$BA|a'b'\rangle = a'\left(B|a'b'\rangle\right) = a'b'\,|a'b'\rangle$$

e como $\{|a'b'\rangle\}$ é uma base do espaço $AB = BA$ ou $[A,B]=0$, contradição!

Consideremos agora uma seqüência de medições. Na primeira medimos um observável A e selecionamos um particular autoket $|a'\rangle$. Na segunda (B) selecionamos um particular autoket $|b'\rangle$ de B, e na terceira selecionamos um particular autoket $|c'\rangle$ de C. Qual é a probabilidade de obter $|c'\rangle$ quando o estado que sai do primeiro filtro está normalizado?



$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{med. de } A} |a'\rangle$$

Supomos que $|a'\rangle$ está normalizado : $\langle a'|a'\rangle = 1$
Então :

$$|a'\rangle = \sum |b'\rangle\langle b'|a'\rangle ,$$

e a segunda medida equivale a projetar sobre $|b'\rangle$

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

Por sua vez, a 3ª medida projeta sobre $|c'\rangle$

$$\Lambda_{c'}\Lambda_{b'}|a'\rangle = \langle b'|a'\rangle \Lambda_{c'}|b'\rangle = |c'\rangle\langle b'|a'\rangle\langle c'|b'\rangle$$

A probabilidade de obter $|c'\rangle$, dado que $|a'\rangle$ é normalizado é então

$$P_{a'b'c'} = |\langle b'|a'\rangle\langle c'|b'\rangle|^2 = |\langle b'|a'\rangle|^2 |\langle c'|b'\rangle|^2$$

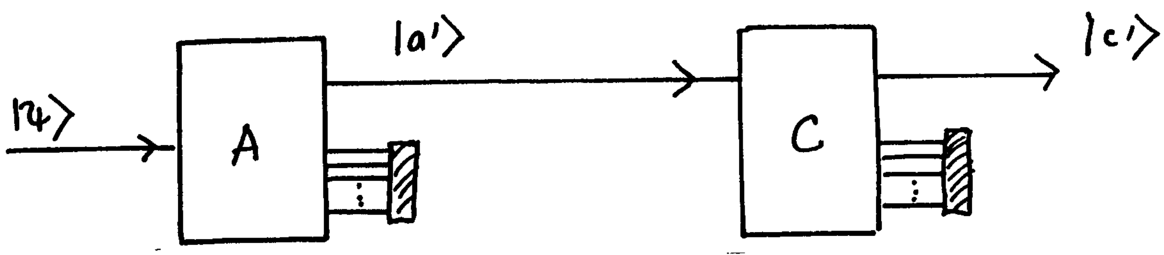
Somando sobre todos os canais $|b'\rangle$ intermediários obtemos

Temos determinado o valorde B em cada caso

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

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

Comparamos agora este resultado com o obtido em um outro arranjo onde o filtro B está ausente.



Temos que:

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

e a probabilidade buscada $P_{a'c'}$ é

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

$$= \left|\sum_{b'} \langle c'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle\right|^2$$

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

$$= \sum_{b'} |\langle b'|a'\rangle|^2 \, |\langle c'|b'\rangle|^2 +$$

$$+ \sum_{b''}\sum_{\substack{b' \\ b''\neq b'}} \langle c'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle\langle a'|b''\rangle\langle b''|c'\rangle$$

Termos de intererência

$$\neq \sum_{b'} P_{a'b'c'}$$

No caso em que B não é medido, aparecem os termos típicos de interferência

variância : quadrado do afastamento
padrão

No caso de termos operadores compatíveis, as duas operações fornecem o mesmo resultado. Imaginemos o caso sem degenerescência, e $[A,B]=[A,C]=[B,C]=0$. Neste caso os autokets $|a'b'c'\rangle$ são simultaneamente autoestados dos três operadores e o ket não é alterado pelas sucessivas medições. De maneira que a propriedade

$$P_{a'c'} \neq \sum_{b'} P_{a'b'c'}$$

é intrínseca de observáveis <u>não compatíveis</u>.

§ Relações de Incerteza

► <u>Def. Operador ΔA</u>

Seja dado o observável A. Definimos o operador ΔA por:

$$\Delta A \equiv A - \langle A \rangle_\psi$$

com $\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | A | \psi \rangle$, onde o ket $|\psi\rangle$ carateriza o nosso estado quântico

► <u>Def. Dispersão, ~~variança~~ ou desvio quadrático médio</u>

$\langle (\Delta A)^2 \rangle$ variância

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

$\boxed{\text{A dispersão é nula para um autoestado do operador } A.}$

<u>Lema 1.</u> Desigualdade de Schwarz

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \geq |\langle\alpha|\beta\rangle|^2$$

<u>Dem.</u> Sabemos que a norma de todo ket é não negativa. Consideremos o ket

$$|\alpha\rangle + \lambda|\beta\rangle$$

$$\| (|\alpha\rangle + \lambda|\beta\rangle) \|^2 = (\langle\alpha| + \langle\beta|\lambda^*)(|\alpha\rangle + \lambda|\beta\rangle) \geqslant 0$$

ou $\quad \langle\alpha|\alpha\rangle + |\lambda|^2\langle\beta|\beta\rangle + \lambda\langle\alpha|\beta\rangle + \lambda^*\langle\beta|\alpha\rangle \geqslant 0$

Esta desigualdade é válida para todo λ. Em particular, consideramos

$$\lambda = -\frac{\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}$$

$$\Rightarrow \quad \langle\alpha|\alpha\rangle + \frac{|\langle\beta|\alpha\rangle|^2}{\langle\beta|\cancel{\beta\rangle^2}}\cancel{\langle\beta|\beta\rangle} - \frac{|\langle\alpha|\beta\rangle|^2}{\cancel{\langle\beta|\beta\rangle}} - \frac{\cancel{|\langle\alpha|\beta\rangle|^2}}{\cancel{\langle\beta|\beta\rangle}} \geqslant 0$$

ou $\quad \langle\alpha|\alpha\rangle - \dfrac{|\langle\alpha|\beta\rangle|^2}{\langle\beta|\beta\rangle} \geqslant 0\,,$

e finalmente

$$\boxed{\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \geqslant |\langle\alpha|\beta\rangle|^2}$$

Lema 2. O valor médio (esperado) de um operador hermitéano é real

Dem. $$\langle A\rangle_\alpha = \langle\alpha|A|\alpha\rangle = \langle\alpha|\{A|\alpha\rangle\} =$$
$$= \left(\{\langle\alpha|A^\dagger\}|\alpha\rangle\right)^* = \langle\alpha|A^\dagger|\alpha\rangle^*$$
$$= \langle\alpha|A|\alpha\rangle^* = \langle A\rangle_\alpha^*$$

Lema 3. O valor médio de um operador anti-hermitéano é puramente imaginário.

Def. Operador anti-hermitéano
$$A^\dagger = -A$$

Dem. Igual que no lema 2:
$$\langle A\rangle_\alpha = \langle\alpha|A^\dagger|\alpha\rangle^* = -\langle\alpha|A|\alpha\rangle^* = -\langle A\rangle_\alpha^*$$

Teorema: Relações de Incerteza

Sejam A e B dois observáveis. Para qualquer estado temos a desigualdade
$$\boxed{\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}\left|\langle[A,B]\rangle\right|^2}$$

Dem. Usamos os Lemas precedentes com

$$|\alpha\rangle = (\Delta A)|\psi\rangle$$
$$|\beta\rangle = (\Delta B)|\psi\rangle$$

A desigualdade de Schwarz fornece

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle = \langle\psi|(\Delta A)^{\dagger}(\Delta A)|\psi\rangle\langle\psi|(\Delta B)^{\dagger}\Delta B|\psi\rangle$$

$$= \langle(\Delta A)^2\rangle_{\psi}\langle(\Delta B)^2\rangle_{\psi} \geq |\langle\psi|(\Delta A)^{\dagger}\Delta B|\psi\rangle|^2$$

ou

$$\langle(\Delta A)^2\rangle_{\psi}\langle(\Delta B)^2\rangle_{\psi} \geq |\langle\Delta A\,\Delta B\rangle_{\psi}|^2$$

Temos a identidade:

$$\Delta A\,\Delta B = \frac{1}{2}[\Delta A, \Delta B] + \frac{1}{2}\{\Delta A, \Delta B\}$$

e $\quad [\Delta A, \Delta B] = [A, B]$, de maneira que

$$\langle\Delta A\,\Delta B\rangle_{\psi} = \frac{1}{2}\langle[A,B]\rangle_{\psi} + \frac{1}{2}\langle\{\Delta A, \Delta B\}\rangle_{\psi}$$

O operador $[A,B]$ é anti-hermiteano e
$\{\Delta A, \Delta B\}$ é hermiteano

$$\Rightarrow \begin{cases} \langle[A,B]\rangle_{\psi} \text{ é puramente imaginário ,} \\ \langle\{\Delta A, \Delta B\}\rangle_{\psi} \text{ é real ,} \end{cases}$$

logo

$$\left|\langle \Delta A\, \Delta B\rangle_\psi\right|^2 = \frac{1}{4}\left|\langle [A,B]\rangle_\psi\right|^2 + \frac{1}{4}\left|\langle \{\Delta A, \Delta B\}\rangle_\psi\right|^2,$$

e portanto

$$\left|\langle \Delta A\, \Delta B\rangle_\psi\right|^2 \geq \frac{1}{4}\left|\langle [A,B]\rangle_\psi\right|^2$$

Assim fica demostrado o Teorema:

$$\langle (\Delta A)^2\rangle_\psi \langle (\Delta B)^2\rangle_\psi \geq \frac{1}{4}\left|\langle [A,B]\rangle_\psi\right|^2$$

▶ H.P. Robertson, Phys. Rev. 34, 163-164 (1929).

§ Mudança da Base

Sejam dois conjuntos ortonormais $\{|a'\rangle\}$ e $\{|b'\rangle\}$ que geram o mesmo espaço vetorial (ortonormais e completos).

$$\langle a'|a''\rangle = \delta_{a'a''} \quad , \quad \langle b'|b''\rangle = \delta_{b'b''}$$

$$1 = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'| = \sum_{b'} |b'\rangle\langle b'|$$

Teorema. Existe um operador unitário que transforma a base, isto é existe um operador U tal que

$$|b^{(j)}\rangle = U|a^{(j)}\rangle \quad , \quad j = 1, 2, \ldots, N$$

► Def: Operador unitário U

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

Dem. Afirmamos que o operador abaixo é unitário e faz o trabalho da mudança da base

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

Em efeito,

$$U|a^{(j)}\rangle = \sum_{\{k\}} |b^{(k)}\rangle \underbrace{\langle a^{(k)}|a^{(j)}\rangle}_{\delta_{kj}}$$

$$= |b^{(j)}\rangle \quad , \quad j = 1, 2, \ldots N$$

Também temos que:

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

e

$$\mathcal{U}^{\dagger}\cdot\mathcal{U} = \sum_{k,k'} |a^{(k)}\rangle\langle \underbrace{b^{(k)}|b^{(k')}}_{\delta_{kk'}}\rangle\langle a^{(k')}|$$

$$= \sum_{k} |a^{(k)}\rangle\langle a^{(k)}| = 1 \qquad \text{c.q.d.}$$

Em outras palavras,

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

Calculando a representação matricial de $\mathcal{U}$ na base $\{|a'\rangle\}$, temos

$$\langle a^{(k)}|U|a^{(l)}\rangle = \sum_{i} \langle a^{(k)}|b^{(i)}\rangle\langle \underbrace{a^{(i)}|a^{(l)}}_{\delta_{il}}\rangle$$

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

Os elementos de matriz de $\mathcal{U}$ na base $\{|a'\rangle\}$ são construídos pelos produtos internos (escalares) entre as duas bases. Este definem a Matriz de Transformação das bases: $\{|a'\rangle\} \longrightarrow \{|b'\rangle\}$.

Seja $|\alpha\rangle$ 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:

$$\langle b^{(k)}|\alpha\rangle = \sum_i \langle b^{(k)}|a^{(i)}\rangle\langle a^{(i)}|\alpha\rangle$$
$$= \sum_i \langle a^{(k)}|U^\dagger|a^{(i)}\rangle\langle a^{(i)}|\alpha\rangle,$$

pois temos:

$$U^\dagger = \sum_k |a^{(k)}\rangle\langle b^{(k)}| \Rightarrow \langle a^{(j)}|U^\dagger|a^{(i)}\rangle =$$
$$= \sum_k \underbrace{\langle a^{(j)}|a^{(k)}\rangle}_{\delta_{jk}}\langle b^{(k)}|a^{(i)}\rangle = \langle b^{(j)}|a^{(i)}\rangle$$

Esta equação pode ser representada em notação matricial. O ket $|a\rangle$ é representado pelas suas componentes arranjadas em um vetor coluna:

$$\begin{pmatrix} \langle b^{(1)}|\alpha\rangle \\ \vdots \\ \langle b^{(N)}|\alpha\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxed{U^\dagger, (N\times N)} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\alpha\rangle \\ \vdots \\ \langle a^{(N)}|\alpha\rangle \end{pmatrix}$$

As novas componentes de $|\alpha\rangle$ são obtidas a partir das velhas através de $\mathcal{U}^\dagger$. Em contrapartida, a mudança da base é dada por $\mathcal{U}$:

$$|b^{(j)}\rangle = \mathcal{U}\,|a^{(j)}\rangle \quad , \; j=1,2,\dots,N$$

Vejamos como transformam os elementos de matriz de um operador X. Calculamos em relação à nova base:

$$X'_{k\ell} \equiv \langle b^{(k)}|X|b^{(\ell)}\rangle = \sum_m \sum_n \langle b^{(k)}|a^{(m)}\rangle\langle a^{(m)}|X|a^{(n)}\rangle \cdot \langle a^{(n)}|b^{(\ell)}\rangle$$

$$= \sum_{m,n} \langle a^{(k)}|\mathcal{U}^\dagger|a^{(m)}\rangle\, X_{mn}\, \langle a^{(n)}|\mathcal{U}|a^{(\ell)}\rangle$$

Em termos de matrizes, isto pode ser representado por:

$$\boxed{X' = \mathcal{U}^\dagger \cdot X \cdot \mathcal{U} = \mathcal{U}^{-1} \cdot X \cdot \mathcal{U}}$$

Esta é chamada <u>Transformação de Similitude</u>

▸ <u>Def.</u>: Traço de um operador X

$$tr(X) \equiv \sum_{a'} \langle a'|X|a'\rangle$$

<u>Teorema</u>. O traço de um operador é uma propriedade independente da base.

Dem. Calculemos o traço na nova representação:

$$t_r'(X) = \sum_i \langle b^{(i)}|X|b^{(i)}\rangle = \sum_{\substack{m,n\\ i}} \langle b^{(i)}|a^{(m)}\rangle\langle a^{(m)}|X|a^{(n)}\rangle \cdot \langle a^{(n)}|b^{(i)}\rangle$$

$$= \sum_{m,n} \sum_i \langle a^{(i)}|U^\dagger|a^{(m)}\rangle\langle a^{(n)}|U|a^{(i)}\rangle \cdot \langle a^{(m)}|X|a^{(n)}\rangle$$

$$= \sum_{m,n} \langle a^{(m)}|X|a^{(n)}\rangle \sum_i \underbrace{\langle a^{(n)}|U|a^{(i)}\rangle\langle a^{(i)}|U^\dagger|a^{(m)}\rangle}_{\delta_{nm}}$$

$$= \sum_m \langle a^{(m)}|X|a^{(n)}\rangle = t_r(X) \qquad \text{c.q.d.}$$

Algumas das propriedades do traço:

$$t_r(XY) = t_r(YX)$$
$$t_r(U^\dagger X U) = t_r(X), \quad U^\dagger = U^{-1}$$
$$t_r\{|a'\rangle\langle a''|\} = \delta_{a'a''}$$
$$t_r(|a'\rangle\langle b'|) = \langle a'|b'\rangle^*$$

Diagonalização de Operadores

Assumamos que temos um observável B, cujos elementos de matriz em relação à base $\{|a'\rangle\}$ são todos conhecidos.

Os dois problemas seguintes <u>são equivalentes</u>:

1) Diagonalizar a matriz de B na base $\{|a'\rangle\}$;
2) Encontrar a matriz unitária U que fornece a mudança da base $\{|a'\rangle\} \to \{|b'\rangle\}$ onde a matriz de B é diagonal.

Em efeito, estamos interessados em obter os autovalores b' e os auto-kets $|b'\rangle$ de B

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

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

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

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

$$\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} & \cdots \\ B_{21} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ \cdots & & & B_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1^{(\ell)} \\ \vdots \\ C_n^{(\ell)} \end{pmatrix} = b^{(\ell)} \begin{pmatrix} C_1^{(\ell)} \\ \vdots \\ C_n^{(\ell)} \end{pmatrix},$$

com
$$B_{ij} \equiv \langle a^{(i)}|B|a^{(j)}\rangle,$$
$$C_k^{(\ell)} \equiv \langle a^{(k)}|b^{(\ell)}\rangle.$$

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

$$\det(B - \lambda \cdot 1) = 0$$

para os autovalores $\{\lambda\}$. Para uma matriz hermiteana, temos $\underline{n}$ autovalores reais que são identificados com os $\{b^{(\ell)}\}$ que queremos determinar. Uma vez conhecidos os autovalores $\{b^{(\ell)}\}$, o sistema pode ser resolvido para os coeficientes lineares

$$C_i^{(k)} \equiv \langle a^{(i)} | b^{(k)} \rangle,$$

exceto por uma constante de normalização. Mas obter estes coeficientes é equivalente a encontrar os elementos de matriz de

$$\mathcal{U} | a^{(i)} \rangle = | b^{(i)} \rangle, \quad (|a'\rangle \to |b'\rangle)$$

com

$$\langle a^{(i)} | \mathcal{U} | a^{(j)} \rangle = \langle a^{(i)} | b^{(j)} \rangle \qquad \text{c.q.d.}$$

§ Observáveis equivalentes por unitaridade

Seja A um observável com autovalores $\{a'\}$ e conjunto completo de auto-kets $\{|a'\rangle\}$. Seja a base $\{|a'\rangle\}$ ortonormal. Seja uma outra base ortonormal $\{|b'\rangle\}$ ligada às $\{|a'\rangle\}$ por uma transformação unitária $\mathcal{U}$.

Conhecendo A e $\mathcal{U}$, podemos construir o operador

$$B = \mathcal{U} A \mathcal{U}^{-1} = \mathcal{U} A \mathcal{U}^{\dagger}$$

► <u>Def</u>: <u>Operadores equivalentes por unitaridade</u>

São dois observáveis A e B, tal que existe uma transformação unitária $\mathcal{U}$ para a qual

$$B = \mathcal{U} A \mathcal{U}^{\dagger}.$$

Neste caso A e B são observáveis "equivalentes" no sentido do

► <u>Teorema</u>. A e B têm espectros equivalentes.

<u>Dem</u>.

Seja $\quad A|a^{(\ell)}\rangle = a^{(\ell)}|a^{(\ell)}\rangle$

$$\mathcal{U} A \underbrace{\mathcal{U}^{\dagger} \cdot \mathcal{U}}_{1} |a^{(\ell)}\rangle = a^{(\ell)} \mathcal{U} |a^{(\ell)}\rangle ,$$

e escrevendo $B \equiv \mathcal{U} A \mathcal{U}^{\dagger}$, obtemos:

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

Colocando de maneira explícita a nova base

$$|b^{(\ell)}\rangle \equiv \mathcal{U}|a^{(\ell)}\rangle ,$$

temos

$$B|b^{(\ell)}\rangle = b^{(\ell)}|b^{(\ell)}\rangle , \quad \text{com}$$

$$b^{(e)} = a^{(e)}$$

Como existem infinitas transformações unitárias, este operador $UAU^{\dagger}$ não é considerado como fundamentalmente diferente de A.

<u>Exemplo</u>. As três componentes do spin (S_x, S_y, S_z). Elas estão ligadas entre si por transformações unitárias que representam rotações em $\pi/2$. Os três observáveis têm o mesmo espectro : $\left(\frac{\hbar}{2}, -\frac{\hbar}{2}\right)$