

## Mecânica Quântica - Aula 5 - Observáveis

Toda teoria física possui o seu próprio conjunto de grandezas observáveis e o seu propósito consiste em descrever (prever) o resultado de medição desses observáveis em sistemas físicos. Por grandezas físicas observáveis, ou mais simplesmente, observáveis entendemos as grandezas passíveis de medição experimental. Por exemplo, podemos fazer medições ditadas:

- \* do spin de um elétron;
- \* da posição de uma partícula;
- \* da energia, momento ou momento angular de um sistema;
- \* do campo elétrico em um dado ponto do espaço.

Logo, para podermos conceber uma teoria física não basta que tenhamos uma formulação matematicamente adequada do espaço de estados, precisamos também de uma representação matemática para os resultados das medições experimentais de alguma propriedade física (spin, energia, momento, momento angular, ...) dos estados do sistema em consideração. Assim como os estados do sistema, aprenderemos nesta aula que os observáveis também são representados por vetores.

Antes de passarmos ao estudo da matemática necessária, é importante termos uma noção clara das propriedades que desejamos que tais observáveis satisfaçam. Primeiramente, como medições experimentais são sempre números reais, precisamos que a ação de um observável sobre um estado do sistema forneça um número real. Em segundo lugar, constatamos observacionalmente que uma sucessão idealmente infinita de medições experimentais de um observável  $A$ , todas sob as mesmas condições físicas do sistema em questão, deverá produzir uma distribuição estatística dentro do conjunto de possíveis medições do observável  $A$ ,  $C(A)$ .

Dessa forma, a teoria física resultante será capaz de associar a cada estado físico de um

sistema e a cada observável sobre ele aplicável uma distribuição de probabilidades que descreve uma sucessão de números reais resultantes de medições experimentais desse observável nesse estado.

## 5.1- Operadores Lineares e Álgebras

Comecemos definindo o conceito de operador linear.

Definição 5.1: " Sejam  $V$  e  $W$  dois espaços vetoriais sobre o corpo dos complexos, um operador linear  $A : D(A) \subseteq V \rightarrow R(A) \subseteq W$ ,  $|\psi\rangle \mapsto A(|\psi\rangle)$ , com  $|\psi\rangle \in D(A)$  e  $A(|\psi\rangle) \in R(A)$  é uma aplicação que satisfaz:

$$A(\alpha|\psi\rangle + \beta|\chi\rangle) = \alpha A(|\psi\rangle) + \beta A(|\chi\rangle),$$

$\forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$  e  $\forall |\psi\rangle, |\chi\rangle \in V$ . "

Note, em particular, que

$$T(|0\rangle) = 0.$$

Operadores lineares são também denominados de aplicações ou transformações lineares. Como quase todos os operadores de interesse na MQ são lineares é usual omitir o adjetivo "linear" e falar apenas em operadores. Adicionalmente, na teoria dos operadores lineares é usual denotar  $T(|\psi\rangle)$  simplesmente por  $T|\psi\rangle$  sempre que não houver ambigüidade.

É importante ressaltar que a especificação do domínio  $D(A)$  é uma parte essencial da definição do operador  $A$ . Em particular, propriedades do operador  $A$  podem depender de uma forma não-trivial de propriedades de  $D(A)$ . O símbolo  $R(A)$  denota a imagem (do inglês, range) do operador  $A$ .

Naturalmente, como estamos interessados em representar observáveis na MQ, cujos espaços de estados são espaços de Hilbert, restringiremos a nossa análise ao caso onde  $V=W$  são espaços de Hilbert.

Caso a dimensão de  $\mathcal{H}$  seja finita, i.e.,  $\dim \mathcal{H} = n \in \mathbb{N}$ , os operadores lineares  $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow R(A) \subseteq \mathcal{H}$  admitem uma representação matricial. Para exibí-la, fixemos uma base de  $\mathcal{H}$ :

$$B = \{ |b_i\rangle \in \mathcal{H}, 1 \leq i \leq n \}.$$

Neste caso,  $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$  pode ser decomposto como:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n |b_i\rangle \langle b_i | \psi \rangle.$$

Se, em particular, escolhermos  $|\psi\rangle = A|b_k\rangle$ ,  $1 \leq k \leq n$ , temos que:

$$A|b_k\rangle = \sum_{i=1}^n |b_i\rangle \langle b_i | A | b_k \rangle \equiv \sum_{i=1}^n |b_i\rangle a_{ik}$$

onde os números

$$a_{ik} := \langle b_i | A | b_k \rangle \in \mathbb{C}$$

são denominadas as componentes da matriz  $A \in \text{Mat}(n, \mathbb{C})$  que é denominada de representação matricial do operador  $A$  com respeito à base  $B$ . Denotar a representação matricial de um operador pelo mesmo símbolo que usamos para denotá-lo é um pequeno abuso de notação que não deve gerar nenhum problema. De uma forma mais geral, podemos denotar o vetor:

$$\mathcal{H} \ni A|\psi\rangle \equiv |A\psi\rangle$$

e considerar o produto escalar entre  $|A\psi\rangle \in \mathcal{H}$  e  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ,

$$\langle \psi | A\psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

que fornece os elementos da matriz  $A$  entre os vetores  $|\psi\rangle$  e  $|\varphi\rangle$ .

Se o espaço de Hilbert em questão for de dimensão infinita, a situação é mais complicada, pois além de **não** podermos empregar representação matricial, é possível que a norma do vetor obtido a partir da ação de  $A$  sobre um vetor unitário qualquer

$$\|A|\psi\rangle\|^2 = \sum_{i \in I} \langle A\psi | b_i \rangle \langle b_i | A\psi \rangle, \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad \|\psi\rangle\|^2 = 1$$

seja finita. Felizmente, no caso de operadores relevantes para a MQ, tais séries são aparentemente sempre convergentes. Portanto, supomos daqui em diante que  $\|A|\psi\rangle\|$  é **sempre finita**, de forma que  $A|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  sempre que  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ .

Adicionalmente, é possível definir as seguintes operações envolvendo operadores.

Sejam  $A, B: D \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ,  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  e  $\alpha \in \mathbb{C}$ :

\* Soma:  $(A+B)|\psi\rangle = A|\psi\rangle + B|\psi\rangle$

\* Produto:  $(AB)|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle)$

\* Multiplicação por escalar:  $(\alpha A)|\psi\rangle = \alpha(A|\psi\rangle)$

Exercício 5.2: " Verifique que os operadores  $(A+B)$ ,  $(AB)$  e  $\alpha A$  são lineares se os operadores  $A, B: D \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  o forem,  $\forall \alpha \in \mathbb{C}$ . "

Claramente, se  $\mathcal{H}$  for de dimensão finita e os operadores  $A$  e  $B$  admitirem representação matricial, então as operações de soma, produto e multiplicação por escalar correspondem às respectivas operações envolvendo as matrizes que representam tais operadores com respeito a uma base fixa.

Dois operadores particularmente importantes são:

\* O operador nulo:  $0: D \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ,  $|\psi\rangle \mapsto 0|\psi\rangle = 0$

\* O operador identidade:  $\mathbb{1} : \mathcal{D} \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, |\psi\rangle \mapsto \mathbb{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle$

Dois noções centrais no contexto de operadores lineares são as de **continuidade** e **limitação**, que definiremos a seguir.

Definição 5.3: "Seja  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  dizemos que o operador  $A$  é **contínuo** se

$$A\left(\lim_{n \rightarrow \infty} |\psi_n\rangle\right) = \lim_{n \rightarrow \infty} A(|\psi_n\rangle)$$

para qualquer sequência  $\{|\psi_n\rangle \in \mathcal{H}, n \in \mathbb{N}\}$  convergente em  $\mathcal{H}$ , i.e., tal que  $\lim_{n \rightarrow \infty} |\psi_n\rangle = |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ."

Logo, para um operador **contínuo** podemos impunemente trocar a sua avaliação pela operação de limite, propriedade muito útil para manipulações algébricas frequentes.

Evidentemente, podemos reescrever a definição 5.3 de continuidade em termos dos mais familiares  $\varepsilon$  e  $\delta$ . Assim, o operador  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  é **contínuo** se

$$\forall \varepsilon > 0, \exists \delta > 0 \mid \|\psi\rangle - |\psi'\rangle\| < \delta \Rightarrow \|A|\psi\rangle - A|\psi'\rangle\| < \varepsilon.$$

Apesar de ser uma propriedade muito desejável para um operador, nem sempre é uma tarefa fácil verificar a continuidade de um operador diretamente a partir da definição. Felizmente, existe uma conexão muito profunda entre os conceitos de continuidade e limitação que proporciona um critério alternativo, e muito mais prático, para verificar se um dado operador é contínuo. Definamos, primeiramente o conceito de **limitação**.

Definição 5.4: "Seja  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ , dizemos que o operador  $A$  é **limitado** se existir uma constante  $M > 0$  tal que  $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ , tivermos que  $\|A|\psi\rangle\| \leq M \|\psi\rangle\|$ ."

Enunciaremos a seguir o resultado que relaciona limitação à continuidade.

Teorema 5.5: "Um operador linear  $A: D \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  é limitado, se e somente se for contínuo."

Relegamos a demonstração deste teorema ao leitor interessado.

## 5.2 - Operadores Auto-adjuntos

Nesta seção definiremos um dos conceitos mais importantes para a formulação matemática da MQ, a noção de operador **auto-adjunto**.

Seja  $A: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  um operador linear limitado. Como  $\forall |\varphi\rangle \in D$   $A|\varphi\rangle \equiv |A\varphi\rangle \in \mathcal{H}$ , podemos definir um funcional linear a partir do produto interno de  $|A\varphi\rangle$  com algum  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ,

$$l(|\varphi\rangle) := \langle \psi | A\varphi \rangle, \quad \forall \varphi \in \mathcal{H}.$$

Exercício 5.6: "Verifique que  $l(|\varphi\rangle)$  definido acima é de fato um funcional linear."

Que tal funcional linear é contínuo, verificamos através de uma simples aplicação da desigualdade de Cauchy-Schwarz e do fato de  $A$  ser limitado,

$$\begin{aligned} |l(|\varphi\rangle)| &= |\langle \psi | A\varphi \rangle| \leq \| \langle \psi | \| \| |A\varphi\rangle \| = \| |\psi\rangle \| \cdot \| |A\varphi\rangle \| \\ &\leq \| |\psi\rangle \| M \| |\varphi\rangle \| = M \| |\psi\rangle \| \| |\varphi\rangle \| \end{aligned}$$

Com isso podemos invocar o lema de Riesz

Teorema 5.7: "Seja  $l: \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$  um funcional linear contínuo, então  $\exists! |\phi\rangle \in \mathcal{H}$  tal que  $l(|\varphi\rangle) = \langle \phi | \varphi \rangle$ ,  $\forall |\varphi\rangle \in \mathcal{H}$ ."

para garantir que existe um único  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$  tal que:

$$\langle \psi | A \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle.$$

Seja então o operador  $S : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ,  $|\psi\rangle \mapsto |\phi\rangle$ , i.e.,  $S|\psi\rangle \equiv S|\psi\rangle = |\phi\rangle$ , de forma que:

$$\langle \psi | A \psi \rangle = \langle S\psi | \psi \rangle.$$

Como o produto interno é sesquilinear (linear no segundo argumento e anti-linear no primeiro) segue que  $S$  é um operador linear. Já da continuidade de  $\langle \psi | A \psi \rangle$ , concluímos que  $S$  é um operador limitado. Com isso podemos introduzir o conceito de operador adjunto.

Definição 5.8: "Seja  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  um operador linear limitado, o operador linear limitado  $A^* : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  que satisfaz:

$$\langle A^* \psi | \varphi \rangle = \langle \psi | A \varphi \rangle, \quad \forall |\psi\rangle, |\varphi\rangle \in \mathcal{H}$$

com  $|A\varphi\rangle \equiv A|\varphi\rangle$  e  $\langle A^*\psi| \equiv \langle \psi|A^*$  é denominado adjunto de  $A$ ."

A operação que associa a cada operador linear limitado  $A$  o seu adjunto  $A^*$  é uma involução que satisfaz as seguintes propriedades:

$$1) (\alpha A + \beta B)^* = \bar{\alpha} A^* + \bar{\beta} B^*$$

$$2) (AB)^* = B^* A^*$$

$$3) (A^*)^* = A$$

$$4) \mathbb{1}^* = \mathbb{1}$$

$A, B : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  operadores lineares e limitados e  $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$ .

Com isso podemos estender o conceito de correspondência dual para acomodar

estados da forma  $A|\psi\rangle$  onde  $A: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  é um operador linear limitado e  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  é um vetor qualquer:

$$A|\psi\rangle \xleftrightarrow{D.C.} \langle \phi | A^* .$$

Naturalmente, para os casos onde o espaço de Hilbert é de dimensão finita e os operadores lineares admitem representação matricial, a noção de operador adjunto coincide com a de matriz adjunta. Assim, se  $A \in \text{Mat}(n \times n, \mathbb{C})$  a matriz adjunta de  $A$ ,  $A^*$  é dada por:  $A^* = \bar{A}^T$ , ou em componentes,  $(A^*)_{ij} = \bar{A}_{ji}$ ,  $1 \leq i, j \leq n$ .

Contudo, como já comentamos anteriormente, alguns dos operadores de interesse na MQ não são limitados. Portanto, a definição 5.8 de operador adjunto não se aplica, posto que tal construção usa explicitamente o lema de Riesz que necessita da continuidade do operador em questão. Felizmente, para algumas classes de operadores **não-continuos** é possível definir o conceito de adjunto, à despeito da inexistência de uma versão do lema de Riesz para operadores não-limitados. O preço a se pagar é um cuidado maior com os domínios de definição dos operadores.

Definição 5.9: "Seja  $A: D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  um operador linear definido em um subconjunto denso\*  $D(A)$  de  $\mathcal{H}$ . O **adjunto** de  $A$ ,  $A^*$  é definido como:  $A^*: D(A^*) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  de forma que

$$\langle \phi | A\psi \rangle = \langle A^*\phi | \psi \rangle, \quad \forall |\psi\rangle \in D(A), \quad \forall \langle \phi | \in D(A^*)." .$$

Note que na definição 5.9 o domínio  $D(A^*)$  é escolhido de forma a garantir a existência de um  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$  de forma a garantir que  $\forall |\psi\rangle \in D(A)$  seja verdade que:

$$\langle \phi | A\psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle$$

\* Um subconjunto  $A \subseteq B$  é **denso** em  $B$  se  $\forall b \in B$  ou  $b \in A$  ou existe uma sequência  $\{a_n \in A \mid n \in \mathbb{N}\}$  que converge para  $b$ .



e assim contornar a inexistência de um análogo do lema de Riesz. Com isso, em geral,

$$D(A) \neq D(A^*) .$$

De posse de uma boa definição para operadores adjuntos, podemos finalmente introduzir o conceito de operadores **auto-adjuntos**.

Definição 5.10: " Seja  $A: D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  um operador linear definido em um subespaço denso  $D(A) \subseteq \mathcal{H}$ , dizemos que  $A$  é um operador **auto-adjunto** se:

$$(i) \quad D(A) = D(A^*)$$

$$(ii) \quad \langle T\psi | \psi \rangle = \langle \psi | T\psi \rangle, \quad \forall |\psi\rangle, |\psi\rangle \in D(A). "$$

Note que para operadores limitados a primeira condição é trivialmente satisfeita, de forma que nestes casos, precisamos apenas verificar a condição (ii) da definição 5.10. Operadores lineares densamente definidos que satisfazem a condição (ii) da definição 5.10 (independentemente de satisfazerem, ou não, a condição (i)) são denominados operadores **simétricos** ou **hermitianos**.

Ressaltamos que no contexto da MQ a noção relevante é a de operador auto-adjunto e não a de operador hermitiano.

### 5.3 - O Teorema Espectral

O interesse em operadores auto-adjuntos no contexto da MQ é justificado pela validade do **teorema espectral** para tais operadores, que garante que certas propriedades de interesse físico são trivialmente satisfeitas. Um estudo completo do teorema espectral está, contudo, fora do escopo deste curso, restringiremo-nos, pois, a uma apresentação geral de suas consequências e sua formulação no contexto mais simples de espaços de Hilbert com dimensão

finita.

Comecemos definindo o conceito de espectro.

Definição 5.11: "Seja  $A: D \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  um operador linear, definimos o **espectro** de  $A$  como o conjunto  $\sigma(A) = \{ \lambda \in \mathbb{C} \mid (\lambda \mathbb{1} - A) \text{ não é bijetor} \}$ ."

Para o caso de espaços de Hilbert com dimensão finita, nos quais os operadores lineares podem ser representados por matrizes quadradas, o espectro coincide com o conjunto de autovalores de  $A \in \text{Mat}(n \times n, \mathbb{C})$ , ou seja, dos  $\lambda \in \mathbb{C}$  tais que

$$A|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle,$$

para algum  $\mathcal{H} \ni |\varphi\rangle \neq 0$ .

Com isso podemos enunciar o primeiro resultado fisicamente relevante sobre operadores auto-adjuntos.

Teorema 5.12: "Seja  $A: D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  um operador linear auto-adjunto, então o seu espectro é um subconjunto da reta real,  $\sigma(A) \subseteq \mathbb{R}$ . Ademais, se  $A$  for limitado, seu espectro é um subconjunto fechado de  $[-\|A\|, \|A\|]$ ."

Para o caso de espaços de Hilbert com dimensão finita, o teorema 5.12 afirma que os autovalores da matriz  $A \in \text{Mat}(n \times n, \mathbb{C})$ , que usamos para representar o operador  $A$ , são reais.

Finalmente, consideramos o **teorema espectral**, que em sua versão mais geral pode ser enunciado da seguinte forma:

Teorema 5.13: " Seja  $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  um operador linear auto-adjunto, então existe uma única medida com valores em projeções ortogonais  $\Pi_\lambda$  tal que

$$A = \int_{\sigma(A)} \lambda d\Pi_\lambda. "$$

Um **projetor ortogonal** é um operador  $\Pi_\lambda : D(A) \rightarrow D(A)$ , com  $\lambda \in \sigma(A)$  que satisfaz as seguintes propriedades:

$$1) \Pi_B^2 = \Pi_B \text{ e } \Pi_B^* = \Pi_B, \forall B \subseteq \sigma(A)$$

$$2) \Pi_\emptyset = 0, \Pi_{\sigma(A)} = \mathbb{1}$$

$$3) \Pi_{B_1} \Pi_{B_2} = \Pi_{B_1 \cap B_2}, \forall B_1, B_2 \subseteq \sigma(A)$$

$$4) \Pi_{\bigcup_{n \in \mathbb{N}} B_n} |\psi\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N \Pi_{B_n} |\psi\rangle, \forall |\psi\rangle \in D(A), B_n \subseteq \sigma(A), n \in \mathbb{N}$$

tais que  $B_k \cap B_l = \emptyset$  sempre que  $k \neq l$

Caso o espectro do operador linear auto-adjunto  $A$  coincida com o conjunto de seus autovalores, podemos interpretar os projetores ortogonais  $\Pi_\lambda$  como um operador que projeta um vetor  $|\psi\rangle \in D(A)$  no subespaço gerado pelos autovetores de  $A$  com autovalor  $\lambda \in \mathbb{C}$ .

Neste caso, é possível representar os projetores ortogonais da seguinte forma

$$\Pi_\lambda = \sum_{i \in I} |\lambda^{(i)}\rangle \langle \lambda^{(i)}|$$

onde usamos o conjunto de índices arbitrários  $I$  para indexar todos os possíveis autovetores de  $A$  com autovalor  $\lambda$ . Naturalmente, se só houver um autovetor correspondendo a um determinado autovalor  $\lambda$ , a expressão acima se simplifica:

$$\Pi_\lambda = |\lambda\rangle \langle \lambda|.$$

Assim, o teorema espectral fornece uma **resolução da identidade**

$$\mathbb{1} = \int_{\sigma(A)} d\Pi_\lambda$$

que no caso onde o espectro coincide com o conjunto (contável) de autovalores  $\lambda$  reduz a

$$\mathbb{1} = \sum_{\lambda \in \sigma(A)} \sum_{i \in I(\lambda)} |\lambda^{(i)}\rangle \langle \lambda^{(i)}|$$

onde novamente o conjunto de índices  $I(\lambda) \subseteq \mathbb{R}$  indexa os autovetores distintos  $|\lambda^{(i)}\rangle$  correspondendo a um mesmo autovalor  $\lambda$ .

Conseqüentemente, para o caso mais simples onde o espectro de um operador linear autoadjunto  $A: \mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  coincide com o conjunto de autovalores de  $A$ , i.e.,  $\sigma(A) = \{ \lambda \in \mathbb{C} \mid A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{D}(A) \}$ , o teorema espectral afirma:

1) Os autovetores de  $A$ ,  $\{ |\lambda^{(i)}\rangle \in \mathcal{D}(A) \mid A|\lambda^{(i)}\rangle = \lambda|\lambda^{(i)}\rangle, \lambda \in \sigma(A),$

$i \in I(\lambda) \}$  formam um conjunto completo, ou seja,

$$|\psi\rangle = \sum_{\lambda \in \sigma(A)} \sum_{i \in I(\lambda)} |\lambda^{(i)}\rangle \langle \lambda^{(i)}| \psi\rangle, \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}.$$

2) Sejam  $\lambda_1, \lambda_2 \in \sigma(A)$ , se  $\lambda_1 \neq \lambda_2$ , então  $\langle \lambda_1 | \lambda_2 \rangle = 0$ .

3) Seja  $\lambda \in \sigma(A)$  um autovalor de  $A$  com **degenerescência**  $n$ , ou seja, existem  $n$  autovetores  $|\lambda^{(i)}\rangle \in \mathcal{D}(A)$ ,  $1 \leq i \leq n$ , tais que  $A|\lambda^{(i)}\rangle = \lambda|\lambda^{(i)}\rangle$ , então o conjunto  $\{ |\lambda^{(i)}\rangle \in \mathcal{D}(A), \lambda \in \sigma(A), 1 \leq i \leq n \}$  é **linearmente independente**. Ademais, tais autovetores podem ser tomados como **ortonormais**.

Uma outra forma de escrever as propriedades acima, garantidas pelo teorema espectral para um operador linear, auto-adjunto  $A$ , atuando sobre um espaço de Hilbert com dimensão finita, é afirmar que existe uma base ortonormal de  $\mathcal{H}$  com respeito a qual  $A$  é **diagonalizável**.

## 5.4 - A Importância do Teorema Espectral na MQ

A importância do teorema espectral na formalização da MQ é enorme, pois é através dele que podemos obter as distribuições probabilísticas associadas a medição de um observável  $A$  em dado estado  $|\psi\rangle$ . A saber, de acordo com o teorema espectral, se  $A: D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  for um operador auto-adjunto, temos que

$$\langle \psi | A \psi \rangle = \int_{\sigma(A)} \lambda \langle \psi | d\Pi_\lambda | \psi \rangle = \int_{\sigma(A)} \lambda d\langle \psi | \Pi_\lambda | \psi \rangle$$

Em particular, se  $\sigma(A)$  coincidir com o conjunto de autovalores de  $A$ ,

$$\langle \psi | A \psi \rangle = \int_{\sigma(A)} \lambda d(\langle \psi | \lambda \rangle \langle \lambda | \psi \rangle) = \int_{\sigma(A)} \lambda d(|\langle \psi | \lambda \rangle|^2)$$

Como a medida  $d\langle \psi | \Pi_\lambda | \psi \rangle$  é positiva em  $\sigma(A)$ , ao notarmos que se  $|\psi\rangle$  for adicionalmente um estado normalizado, i.e.,  $\|\psi\rangle\|^2 = 1$ , temos que:

$$\int_{\sigma(A)} d\langle \psi | \Pi_\lambda | \psi \rangle = 1.$$

Essas duas consequências do teorema espectral afirmam que  $d\langle \psi | \Pi_\lambda | \psi \rangle$  é uma **medida de probabilidade**. Assim, o teorema espectral nos ensina como associar a um operador auto-adjunto  $A$  atuando sobre um vetor unitário  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  uma **distribuição de probabilidades** em  $\sigma(A)$ . Finalmente, lembrando que para um operador auto-adjunto  $A$ ,  $\sigma(A) \subseteq \mathbb{R}$  e que representamos estados físicos por vetores unitários em um espaço de Hilbert, podemos representar um observável  $A$  por um operador auto-adjunto  $A: D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ , pois dessa maneira obtemos univocamente uma distribuição de probabilidades sobre  $C(A) \equiv \sigma(A)$ .

Com isso podemos enumerar mais três dos princípios fundamentais da MQ:

AXIOMA 2: " Um observável físico é representado por um operador linear auto-adjunto  $A: \mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ . Os possíveis resultados de uma medição experimental do observável representado por  $A$  são elementos de seu espectro  $\sigma(A) \subseteq \mathbb{R}$ . "

AXIOMA 3: " Seja um estado do sistema representado por  $|\psi\rangle \in \mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{H}$ , então ao efetuarmos uma medição experimental do observável  $A: \mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ , a probabilidade de obtermos o valor  $\lambda \in \sigma(A)$  é

$$P_\lambda = \langle \psi | \Pi_\lambda | \psi \rangle.$$

O valor médio ou esperado de uma medição de  $A$  é:

$$\langle A \rangle := \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_{\lambda \in \sigma(A)} \lambda \langle \psi | \Pi_\lambda | \psi \rangle = \sum_{\lambda \in \sigma(A)} \lambda P_\lambda$$

com  $P_\lambda \geq 0$ , e

$$\sum_{\lambda \in \sigma(A)} P_\lambda = 1. "$$

AXIOMA 4: " Para todo estado físico  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  existe um operador para o qual  $|\psi\rangle$  é um autoestado. "

## 5.4 - Operadores de Spin

No experimento de Stern-Gerlach estávamos interessados em saber a orientação do spin do elétron de valência de um átomo de prata ao longo de uma certa direção espacial. Experimentalmente, acessamos tal grandeza física através de medições com os aparatos  $S_{Gx}$ ,  $S_{Gy}$  e  $S_{Gz}$ . Conseqüentemente, os observáveis fisicamente relevantes são as componentes do spin ao longo dos eixos coordenados:

$S_x$ ,  $S_y$  e  $S_z$ . Logo, de acordo com o AXIOMA 2 tais observáveis devem ser representados por operadores lineares, auto-adjuntos:

$$S_i: \mathcal{D}_i \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \text{ auto-adjunto, } i = x, y, z,$$

onde  $\mathcal{H}$  é o espaço de Hilbert que construímos nas aulas anteriores para representar os estados observados pelo experimento de Stern-Gerlach, a saber,

$\mathcal{H} = \{ |\psi\rangle \in \mathbb{C}^2 \mid \|\psi\rangle\|^2 = 1, |\psi\rangle = c|\varphi\rangle, \forall c \in \mathbb{C}^*, \forall |\varphi\rangle \in \mathbb{C}^2 \}$ ,  
em conformidade com o AXIOMA 1.

Nossa próxima tarefa consiste em construir tais operadores auto-adjuntos. Ainda do AXIOMA 2 sabemos que os valores experimentalmente obtidos a partir de uma medição do observável  $S_i$  devem ser elementos de seu espectro:

$$\sigma(S_i) = \{+\hbar/2, -\hbar/2\} \subseteq \mathbb{R}, \quad i = x, y, z.$$

Como  $\dim \mathcal{H} = 2$ , temos que o espectro coincide com o conjunto de autovalores de  $S_i$ . Posto que os autovalores são distintos é uma conclusão imediata do teorema espectral que cada  $S_i$  possui dois autovetores ortogonais:

$$|S_i+\rangle, |S_i-\rangle \in \mathcal{H}, \quad i = x, y, z.$$

tais que:

$$S_i |S_i+\rangle = \hbar/2 |S_i+\rangle, \quad i = x, y, z$$

$$S_i |S_i-\rangle = -\hbar/2 |S_i-\rangle$$

Ademais, o teorema espectral afirma que:

$$\begin{aligned} S_i &= \sum_{\lambda \in \sigma(A)} \lambda \Pi_\lambda = \sum_{\lambda \in \sigma(A)} \lambda |\lambda\rangle\langle\lambda| \\ &= \hbar/2 |S_i+\rangle\langle S_i+| - \hbar/2 |S_i-\rangle\langle S_i-|, \quad i = x, y, z \end{aligned}$$

com

$$\begin{aligned} \mathbb{1} &= \sum_{\lambda \in \sigma(A)} \Pi_\lambda = \sum_{\lambda \in \sigma(A)} |\lambda\rangle\langle\lambda| \\ &= |S_i+\rangle\langle S_i+| + |S_i-\rangle\langle S_i-|, \quad i = x, y, z. \end{aligned}$$

Por lidarmos com um espaço de Hilbert com dimensão finita, sabemos que os automorfismos lineares admitem uma representação matricial em termos de

elementos de  $\text{Mat}(2 \times 2, \mathbb{C})$ . Para obtermos tais matrizes, precisamos, contudo, fixar uma base de  $\mathcal{H}$ . Novamente, do teorema espectral sabemos que o conjunto de autovetores de um operador auto-adjunto fornece uma base ortonormal de  $\mathcal{H}$ . Fazemos, pois, uma escolha compatível com a da aula anterior, ao tomarmos como elementos da base os autostados de  $S_z$ :

$$\mathcal{B} = \{ |S_z+\rangle, |S_z-\rangle \},$$

que podem ser representados em termos da base canônica de  $\mathbb{C}^2$ :

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

Os elementos da matriz que representa  $S_z : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ , autoadjunto, podem ser obtidos a partir das equações de autovalor/autovetor satisfeitas por  $S_z$ :

$$S_z |S_z \pm\rangle = \pm \hbar/2 |S_z \pm\rangle,$$

ao considerarmos suas projeções da base  $\mathcal{B}$ :

$$\langle S_z+ | S_z | S_z+ \rangle = \hbar/2 \langle S_z+ | S_z+ \rangle = \hbar/2$$

$$\langle S_z+ | S_z | S_z- \rangle = -\hbar/2 \langle S_z+ | S_z- \rangle = 0$$

$$\langle S_z- | S_z | S_z+ \rangle = \hbar/2 \langle S_z- | S_z+ \rangle = 0$$

$$\langle S_z- | S_z | S_z- \rangle = -\hbar/2 \langle S_z- | S_z- \rangle = -\hbar/2$$

que nos permitem concluir que:

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

É importante notar que a matriz acima que representa  $S_z$  pode ser escrita como:

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



Como  $\pm \hbar/2 \in \sigma(S_z)$ , o teorema espectral afirma que as matrizes que aparecem multiplicando os autovalores são os respectivos projetores espectrais, i.e.,

$$S_z = \sum_{\lambda \in \sigma(S_z)} \lambda \Pi_\lambda = \hbar/2 \Pi_{\hbar/2} - \hbar/2 \Pi_{-\hbar/2},$$

$$\Rightarrow \Pi_{\hbar/2} = |S_z+\rangle \langle S_z+| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\Pi_{-\hbar/2} = |S_z-\rangle \langle S_z-| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Note que em conformidade com o teorema espectral temos que:

$$\sum_{\lambda \in \sigma(S_z)} \Pi_\lambda = \Pi_{\hbar/2} + \Pi_{-\hbar/2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbb{1}.$$

Apesar de não serem projetores, os seguintes objetos nos serão úteis:

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

Similarmente, podemos obter as representações matriciais dos demais operadores de spin  $S_x$  e  $S_y$  em termos da base de autovetores de  $S_z$ . Para tanto, recordamos a decomposição dos vetores  $|S_x+\rangle \in \mathcal{H}$  e  $|S_x-\rangle \in \mathcal{H}$  em termos de  $B$ :

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

e consideramos o problema de autovalores satisfeito por  $S_x$ :

$$S_x |S_x \pm\rangle = \pm \hbar/2 |S_x \pm\rangle.$$

Precisamos agora calcular os seguintes elementos de matriz:

$$\langle S_z+ | S_x | S_z+\rangle, \langle S_z+ | S_x | S_z-\rangle, \langle S_z- | S_x | S_z+\rangle, \langle S_z- | S_x | S_z-\rangle.$$

Logo, precisamos avaliar a ação de  $S_x$  nos elementos da base  $B$ . O modo mais simples de prosseguir consiste em inverter a relação que expressa  $|S_x \pm\rangle$  em termos de  $|S_z \pm\rangle$

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

e utilizar as equações de autovalores:

$$\begin{aligned}
 (*) \quad \langle S_z+ | S_x | S_z+ \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_z+ | S_x ( |S_x+\rangle + |S_x-\rangle ) \\
 &= \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} \langle S_z+ | ( |S_x+\rangle - |S_x-\rangle ) \\
 &= \frac{\hbar}{4} ( \langle S_x+ | + \langle S_x- | ) ( |S_x+\rangle - |S_x-\rangle ) \\
 &= \frac{\hbar}{4} ( \langle S_x+ | S_x+ \rangle - \langle S_x+ | S_x- \rangle + \langle S_x- | S_x+ \rangle - \langle S_x- | S_x- \rangle ) \\
 &= \frac{\hbar}{4} ( 1 - 0 + 0 - 1 ) \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (*) \quad \langle S_z+ | S_x | S_z- \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_z+ | S_x ( |S_x+\rangle - |S_x-\rangle ) \\
 &= \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} \langle S_z+ | ( |S_x+\rangle + |S_x-\rangle ) \\
 &= \frac{\hbar}{4} ( \langle S_x+ | + \langle S_x- | ) ( |S_x+\rangle + |S_x-\rangle ) \\
 &= \frac{\hbar}{4} ( \langle S_x+ | S_x+ \rangle + \langle S_x+ | S_x- \rangle + \langle S_x- | S_x+ \rangle + \langle S_x- | S_x- \rangle ) \\
 &= \frac{\hbar}{4} ( 1 + 0 + 0 + 1 ) \\
 &= \frac{\hbar}{2}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (*) \quad \langle S_z- | S_x | S_z+ \rangle &= \overline{\langle S_z+ | S_x^* | S_z- \rangle} \\
 &= \overline{\langle S_z+ | S_x | S_z- \rangle} \\
 &= \overline{\frac{\hbar}{2}} \\
 &= \frac{\hbar}{2}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (*) \quad \langle S_z- | S_x | S_z- \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_z- | S_x ( |S_x+\rangle - |S_x-\rangle ) \\
 &= \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} \langle S_z- | ( |S_x+\rangle + |S_x-\rangle ) \\
 &= \frac{\hbar}{4} ( \langle S_x+ | - \langle S_x- | ) ( |S_x+\rangle + |S_x-\rangle ) \\
 &= \frac{\hbar}{4} ( \langle S_x+ | S_x+ \rangle + \langle S_x+ | S_x- \rangle - \langle S_x- | S_x+ \rangle - \langle S_x- | S_x- \rangle ) \\
 &= \frac{\hbar}{4} ( 1 + 0 - 0 - 1 ) \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

Portanto, em termos da base de autoestados de  $S_z$ , podemos representar o operador  $S_x$  pela seguinte matriz:

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

Note que a expressão acima não gera nenhuma contradição com o teorema espectral, ao não empregar projetores que fornecem uma decomposição da identidade  $\mathbb{1} \in \text{Mat}(2 \times 2, \mathbb{C})$ , pois não decomponemos  $S_x$  com respeito a uma base formada por seus autovetores,  $|S_x \pm\rangle$ , mas sim com respeito a uma base de autovetores de  $S_z$ . Ademais os pesos que multiplicam tais "projetores" não precisam coincidir com todos os elementos do espectro de  $S_x$ ,  $\sigma(S_x)$ .

Finalmente, procedendo de uma maneira inteiramente análoga, podemos encontrar uma representação matricial para  $S_y$ :

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

Exercício 5.14: "Obtenha a representação matricial de  $S_y$  a partir da análise das equações de autovalores por ele satisfeitas."

É usual representar os operadores de spin ao longo dos eixos coordenados,  $S_x$ ,  $S_y$  e  $S_z$  em termos das **matrizes de Pauli**:

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

da seguinte forma:

$$S_z = \hbar/2 \sigma_z, \quad S_x = \hbar/2 \sigma_x, \quad S_y = \hbar/2 \sigma_y.$$

Note adicionalmente que o conjunto  $\{\mathbb{1}, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\} \subseteq \text{Mat}(2 \times 2, \mathbb{C})$  é uma base.

Exercício 5.15: "Demonstre tal afirmação."

## 5.5 - Medições Experimentais

O AXIOMA 2 nos ensina que todos os observáveis físicos devem ser representados por operadores lineares auto-adjuntos, cujo espectro corresponde aos valores experimentalmente mensuráveis. A pergunta que se torna relevante então é a seguinte:

"Dado um sistema físico em um estado  $|\psi\rangle$ , qual é o resultado esperado de uma medição do observável  $A$ ?"

É claro pelo AXIOMA 2 que há uma conexão profunda, porém sutil, entre operadores e medições experimentais. Começemos listando explicitamente o que o AXIOMA 2 afirma sobre o papel dos operadores na MQ:

- 1) Os operadores são os objetos que usamos para calcular o espectro e os projetores espectrais, que no caso mais simples,  $\sigma(A)$  = conjunto dos autovalores se reduz ao cálculo dos autovalores e autovetores.
- 2) Operadores atuam sobre vetores de estado, que são elementos de um espaço de Hilbert, **não** sobre sistemas físicos.
- 3) Quando um operador atua sobre um vetor de estado, ele produz um novo vetor de estado.

Um erro muito usual cometido por neófitos é **confundir** a medição de um certo observável com a ação do respectivo operador sobre um estado. Por exemplo, suponha que desejemos efetuar a **medição experimental** do observável  $A$  em um certo sistema físico. A medição experimental consiste de alguma operação experimental efetuada por um **aparato experimental** sobre o sistema. Contudo tal operação **não** corresponde de forma alguma à ação do **operador**  $A$  sobre o estado que representa o sistema. A saber, se o sistema se encontra no estado  $|\psi\rangle$  antes da medição do observável  $A$

**não** é correto afirmar que a medição de  $A$  muda o estado do sistema para  $A|\psi\rangle$ .

Ilustremos esse importantíssimo ponto com um exemplo no contexto do experimento de Stern-Gerlach.

Exemplo 5.15: " Considere, inicialmente um sistema preparado no estado  $|S_z-\rangle$ . Claramente qualquer medição efetuada por um aparato  $SG_z$  fornecerá  $-\hbar/2$  como resultado. Similarmente, ao atuarmos sobre  $|S_z-\rangle$  com o respectivo operador linear auto-adjunto  $S_z$ , obtemos:

$$S_z |S_z-\rangle = -\hbar/2 |S_z-\rangle,$$

ou seja, neste caso o operador transforma o estado inicialmente preparado,  $|S_z-\rangle$ , no estado pós-medição experimental correspondente,  $-\hbar/2 |S_z-\rangle$ . Note, contudo que, em virtude do AXIOMA 1, os vetores  $|S_z-\rangle$  e  $-\hbar/2 |S_z-\rangle$  representam exatamente o mesmo estado físico. Nenhuma contradição até aqui.

Consideremos, então, a ação do operador  $S_z$  sobre um estado que **não** corresponda a um de seus autovetores, por exemplo:

$$|S_x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z-\rangle.$$

Claramente,

$$\begin{aligned} S_z |S_x+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} S_z |S_z+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} S_z |S_z-\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} |S_z+\rangle - \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} |S_z-\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2} |S_x-\rangle. \end{aligned}$$

No entanto, sabemos que ao efetuarmos uma medição experimental de  $SG_z$  em qualquer estado, o resultado seria ou  $\hbar/2$ , deixando o

sistema no estado  $|S_z+\rangle$ , ou  $-\hbar/2$ , deixando-o no estado  $|S_z-\rangle$ . Nenhum dos casos corresponde à superposição representada por  $|S_x-\rangle$ .

Conseqüentemente, não é o AXIOMA 2 que estabelece de uma forma concreta a relação entre a medição experimental de um observável e a ação do respectivo operador, sobre o estado no qual o sistema se encontra imediatamente antes da medição. Tal papel é feito pelo AXIOMA 3, que nos ensina como obter as distribuições de probabilidade  $P_\lambda = \langle \Psi | \Pi_\lambda | \Psi \rangle \in [0, 1]$  de obtermos o valor  $\lambda \in \sigma(A)$  a partir de uma medição experimental do observável  $A$  num sistema no estado  $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ . Ademais, o AXIOMA 3 afirma que:

$$\sum_{\lambda \in \sigma(A)} P_\lambda = 1,$$

garantindo a interpretação de  $P_\lambda$  como uma probabilidade.

Adicionalmente, o AXIOMA 3 nos diz que o valor médio (ou esperado) de uma medição do observável  $A$  num sistema no estado  $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$  é:

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \sum_{\lambda \in \sigma(A)} \lambda P_\lambda,$$

que corresponde a uma média ponderada dos elementos  $\lambda \in \sigma(A)$  com os pesos dados por suas respectivas probabilidades,  $P_\lambda$ .

Do ponto de vista experimental, podemos determinar as distribuições de probabilidade  $P_\lambda$  a partir da fração das medições experimentais que resultaram no valor  $\lambda \in \sigma(A)$ . Neste caso,  $\langle A \rangle$  coincide com a média experimental das observações. Naturalmente, há uma hipótese adicional sendo feita aqui, a saber, de que se o número de dados experimentais for grande o suficiente, as noções matemática e experimental de probabilidade e média coincidem.

A seguir relacionamos as distribuições de probabilidade  $P_\lambda$  advindas do AXIOMA 3

com a noção de probabilidade e amplitude de probabilidade discutidas anteriormente.

Por simplicidade do raciocínio, considere um observável  $A$  representado por um operador linear auto-adjunto  $A: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  cujo espectro,  $\sigma(A)$ , é um conjunto enumerável correspondendo aos autovalores de  $A$ , ou seja,

$$\sigma(A) = \{ \lambda_i \in \mathbb{R} \mid A|\lambda_i\rangle = \lambda_i|\lambda_i\rangle, i \in I \subseteq \mathbb{N} \}.$$

Seja então  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  um estado arbitrário, que naturalmente pode ser decomposto em uma base formada por autoestados de  $A$ ,  $B = \{ |\lambda_i\rangle \in \mathcal{H} \mid \lambda_i \in \sigma(A) \}$ ,

$$|\psi\rangle = \sum_{i \in I} \Pi_i |\psi\rangle = \sum_{i \in I} |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i | \psi \rangle = \sum_{i \in I} |\lambda_i\rangle \psi_i,$$

e considere a ação de  $A$  sobre tal  $|\psi\rangle$ :

$$A|\psi\rangle = \sum_{i \in I} A|\lambda_i\rangle \psi_i = \sum_{i \in I} \lambda_i |\lambda_i\rangle \psi_i = \sum_{i \in I} \lambda_i \psi_i |\lambda_i\rangle.$$

Finalmente, ao considerarmos o produto interno de  $|\psi\rangle$  com  $A|\psi\rangle$ , obtemos:

$$\begin{aligned} \langle \psi | A | \psi \rangle &= \sum_{j \in I} (\bar{\psi}_j \langle \lambda_j |) \sum_{i \in I} (\lambda_i \psi_i | \lambda_i \rangle) \\ &= \sum_{i, j \in I} \lambda_i \bar{\psi}_j \psi_i \langle \lambda_j | \lambda_i \rangle, \end{aligned}$$

do teorema espectral sabemos que  $\langle \lambda_j | \lambda_i \rangle = \delta_{ij}$ , logo,

$$\begin{aligned} \langle \psi | A | \psi \rangle &= \sum_{i \in I} \lambda_i \bar{\psi}_i \psi_i \\ &= \sum_{i \in I} \lambda_i |\psi_i|^2. \end{aligned}$$

Por outro lado o AXIOMA 3 afirma que:

$$\sum_{i \in I} \lambda_i P_i = \langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

Portanto,

$$\sum_{i \in I} \lambda_i P_i = \sum_{i \in I} \lambda_i |\psi_i|^2.$$

Permitindo, pois, que identifiquemos  $|\psi_i|^2$  com a probabilidade  $P_i$ .

Assim, fica claro como o AXIOMA 3 estabelece a relação entre a ação de um operador auto-adjunto sobre um vetor de estado do sistema e os resultados de medição

experimentais. De uma forma mais concreta, a ação de um operador linear auto-adjunto  $A: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  sobre um estado  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  fornece um novo vetor de estado  $A|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  a partir do qual podemos calcular as probabilidades de cada um dos possíveis resultados experimentais.

Exemplo 5.16: "Revisitemos a segunda parte do exemplo 5.15. Queremos calcular as probabilidades de obtermos os valores  $\pm \hbar/2$  após uma medição de  $S_{Gz}$  num sistema preparado no estado  $|S_{x+}\rangle$ , bem como o valor de expectativa desta medição. Do exemplo 5.15, sabemos que:

$$S_z |S_{x+}\rangle = \hbar/2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{z+}\rangle - \hbar/2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{z-}\rangle.$$

Notando que:

$$\begin{aligned} \|S_z |S_{x+}\rangle\|^2 &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \cdot \frac{1}{2} (\langle S_{z+}| - \langle S_{z-}|) (|S_{z+}\rangle - |S_{z-}\rangle) \\ &= \hbar^2/8 (1+1) = \hbar^2/4 \end{aligned}$$

concluimos que precisamos normalizar o estado  $S_z |S_{x+}\rangle$  para podermos avaliar as probabilidades desejadas. A saber, devemos considerar

$$|\psi\rangle = \|S_z |S_{x+}\rangle\|^{-1} \cdot S_z |S_{x+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{z+}\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{z-}\rangle.$$

Conseqüentemente,

$$\begin{aligned} P_{\hbar/2} &= |\langle S_{z+} | \psi \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_{z+} | (|S_{z+}\rangle - |S_{z-}\rangle) \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = 1/2, \end{aligned}$$

$$P_{-\hbar/2} = |\langle S_{z-} | \psi \rangle|^2 = \left| -\frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = 1/2,$$

que em conformidade com o Axioma 3 satisfazem:

$$P_{\pm \hbar/2} \in [0, 1] \text{ e } \sum_{\lambda \in \sigma(S_z)} P_\lambda = 1/2 + 1/2 = 1.$$

Com isso podemos calcular o valor esperado de uma medição de  $S_{Gz}$  em  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ . A saber,



$$\langle S_z \rangle = \langle \Psi | S_z | \Psi \rangle = \sum_{\lambda \in \sigma(A)} \lambda P_\lambda = \hbar/2 P_{\hbar/2} - \hbar/2 P_{-\hbar/2} = \hbar/2 \cdot 1/2 - \hbar/2 \cdot 1/2 = 0. "$$

Exercício 5.17 : " Considere um sistema no estado  $|S_y-\rangle$ , qual é a probabilidade de obtermos o valor  $\hbar/2$  numa medição de  $S_{Gz}$ ? Qual é a probabilidade de se obter  $-\hbar/2$  nesta mesma medição? Finalmente, qual é o valor esperado desta medição? "

## 5.6 - O Princípio de Polarização de Spins

Nesta seção vamos explorar as consequências do AXIOMA 4 no contexto do experimento de Stern-Gerlach. O AXIOMA 4 nos ensina que para qualquer estado físico  $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$  existe um observável  $A: D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  linear e autoadjunto para o qual tal estado  $|\Psi\rangle$  é um autoestado, i.e.,

$$A|\Psi\rangle = \alpha |\Psi\rangle, \quad \alpha \in \sigma(A) \subseteq \mathbb{R}.$$

Novamente, no experimento de Stern-Gerlach estávamos interessados em medir a componente do spin do elétron de valência de átomos de prata ao longo de um eixo coordenado.

Para descobermos os resultados medidos ao longo dos eixos  $\hat{O}_x$ ,  $\hat{O}_y$  e  $\hat{O}_z$  pelos aparatos  $S_{Gx}$ ,  $S_{Gy}$  e  $S_{Gz}$ , introduzimos, de acordo com os AXIOMAS 1-3, um espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$ , gerado por uma base de autoestados de um dos observáveis  $S_x$ ,  $S_y$  e  $S_z$ . Naturalmente, nada nos proíbe de considerar o seguinte estado arbitrário:

$$|\alpha\rangle = \alpha_+ |S_z+\rangle + \alpha_- |S_z-\rangle \in \mathcal{H}.$$

O AXIOMA 4 afirma, pois, que existe um observável  $S: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  linear e autoadjunto tal que:

$$S|\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle.$$

Essa consequência imediata do Axioma 4 para o sistema de dois níveis que descreve o spin recebe o nome de **Princípio de polarização do spin**. Fisicamente, ele significa que para qualquer estado de spin do sistema **existe** uma orientação do aparato de SG tal que ele registre  $+\hbar/2$  quando atuarmos com tal SG sobre o estado em questão. Nossa próxima tarefa consiste em construir o operador que representa tal observável.

Notando que uma direção arbitrária no espaço tridimensional pode ser representada por um vetor unitário  $\mathbf{n} \in \mathbb{R}^3$ , ou seja, com  $\|\mathbf{n}\| = 1$  e que ele pode ser decomposto na base canônica de  $\mathbb{R}^3$  da seguinte forma:

$$\mathbf{n} = n_x \mathbf{e}_x + n_y \mathbf{e}_y + n_z \mathbf{e}_z ; \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbb{R} \quad \text{tais que}$$

$$\|\mathbf{n}\| = 1 \quad \Rightarrow \quad n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1$$

e que medimos a componente  $S_i$  do spin ao alinharmos o aparato de SG ao longo da direção  $\mathbf{e}_i$ , concluímos que para medirmos a componente  $S_{\mathbf{n}}$  do spin, basta alinharmos SG ao longo de  $\mathbf{n}$ . Logo, o operador  $S_{\mathbf{n}}$  deve ser da seguinte forma:

$$S_{\mathbf{n}} = n_x S_x + n_y S_y + n_z S_z : \quad \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} .$$

Usando que  $S_i = \hbar/2 \sigma_i$ , temos que:

$$S_{\mathbf{n}} = \hbar/2 (n_x \sigma_x + n_y \sigma_y + n_z \sigma_z)$$

$$= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} n_z & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & -n_z \end{pmatrix}$$

É usual empregar a seguinte notação vetorial para  $S_{\mathbf{n}}$ :

$$S_{\mathbf{n}} = \mathbf{n} \cdot \mathcal{S} = \hbar/2 \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

onde  $\mathcal{S} := (S_x, S_y, S_z)$  e  $\boldsymbol{\sigma} := (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ .

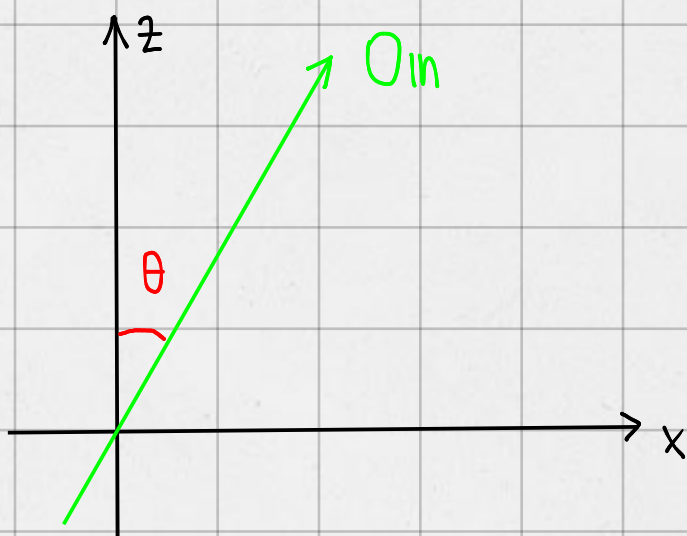
Exercício 5.18: "Verifique que o operador  $S_{\mathbf{n}}: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$  definido anteriormente é linear e autoadjunto."

Apesar de ser fácil constatar que tal  $S_{\mathbf{n}}: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$  é de fato um operador linear autoadjunto, não é óbvio que ele constitui um operador de spin a menos que  $\mathbf{n} = \mathbf{e}_i$ . O próximo exemplo ilustra um caso em que  $S_{\mathbf{n}}$  descreve um operador de spin para  $\mathbf{n} \neq \mathbf{e}_i$ .

Exemplo 5.19: "Considere o caso particular no qual orientamos o aparato de SG ao longo de uma direção contida no plano  $\hat{O}_{xz}$ . Podemos representar qualquer vetor não-nulo do plano através de coordenadas polares, neste caso como  $\mathbf{n}$  é unitário e contido no plano  $\hat{O}_{xz}$ , temos que

$$\mathbf{n} = (\sin \theta, 0, \cos \theta),$$

onde  $\theta \in [0, 2\pi]$  é o ângulo entre o eixo  $\hat{O}_z$  e o eixo definido por  $\mathbf{n}$



Neste caso, temos que:

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{n}} &= \frac{\hbar}{2} (\sin \theta \sigma_x + \cos \theta \sigma_z) \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Para podermos caracterizar  $S_{\mathbf{n}}$  como um operador de spin, precisamos saber quais são os possíveis valores obtidos através de uma medição experimental do observável

correspondente, bem como as respectivas probabilidades. O AXIOMA 2 nos diz que os possíveis resultados experimentais obtidos a partir de uma medição de  $S_m$  são os elementos de seu espectro,  $\sigma(S_m)$ . Como  $S_m \in \text{Mat}(2 \times 2, \mathbb{C})$ , sabemos que  $\sigma(S_m) = \{ \lambda \in \mathbb{R} \mid \det(S_m - \lambda \mathbb{1}) = 0 \}$ . Calculemos, pois, os autovalores de  $S_m$ :

$$\begin{aligned} \det(S_m - \lambda \mathbb{1}) &= \det \begin{pmatrix} \hbar/2 \cos \theta - \lambda & \hbar/2 \sin \theta \\ \hbar/2 \sin \theta & -\hbar/2 \cos \theta - \lambda \end{pmatrix} \\ &= -\frac{\hbar^2}{4} \cos^2 \theta + \lambda^2 - \frac{\hbar^2}{4} \sin^2 \theta = -\frac{\hbar^2}{4} + \lambda^2 \end{aligned}$$

$$\therefore \det(S_m - \lambda \mathbb{1}) = 0 \iff \lambda = \pm \hbar/2$$

$$\therefore \sigma(S_m) = \{ \pm \hbar/2 \}$$

Conseqüentemente, qualquer medição de  $S_m$  resulta em  $\pm \hbar/2$ . A seguir, para calcularmos a probabilidade de obtermos o valor  $\pm \hbar/2$  numa medição experimental, precisamos calcular os autovetores de  $S_m$ , posto que de acordo com o AXIOMA 3 tais probabilidades são dadas por:

$$P_{\pm} = \langle \psi | \Pi_{\pm} | \psi \rangle = \langle \psi | S_m \pm \rangle \langle S_m \pm | \psi \rangle = |\langle \psi | S_m \pm \rangle|^2$$

onde  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  é algum estado arbitrário.

1)  $|S_m+\rangle$ : Escrevamos  $|S_m+\rangle$  como um vetor arbitrário de  $\mathbb{C}^2$ :

$$|S_m+\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad \text{que satisfaz} \quad S_m |S_m+\rangle = \hbar/2 |S_m+\rangle$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a \cos \theta + b \sin \theta \\ a \sin \theta - b \cos \theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Notamos que apenas uma das equações do sistema é independente, pois

$$\det(S_m - \hbar/2 \mathbb{1}) = 0. \quad \text{Assim, consideramos somente a primeira delas:}$$

$$a \cos \theta + b \sin \theta = a \Leftrightarrow a (\cos \theta - 1) + b \sin \theta = 0$$

Para prosseguirmos precisamos fazer a restrição  $\sin \theta \neq 0 \Leftrightarrow \theta \neq n\pi$ ,  $n \in \mathbb{Z}$ , que corresponde ao eixo definido por  $n$  **distinto** do eixo  $\hat{O}_z$ . Como para  $n // \hat{e}_z$  a solução já é conhecida podemos continuar sem nenhuma perda de generalidade.

$$\Rightarrow b = \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} a = \frac{2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}{2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}} a = \tan \frac{\theta}{2} a$$

onde usamos as identidades trigonométricas:

$$* \cos \alpha - \cos \beta = -2 \sin \left( \frac{\alpha - \beta}{2} \right) \cdot \cos \left( \frac{\alpha + \beta}{2} \right) \quad \text{com } \alpha = 0, \beta = \theta$$

$$* \sin \theta = \sin (2 \cdot \theta/2) = 2 \sin (\theta/2) \cos (\theta/2)$$

Precisamos de mais uma equação para determinarmos o par  $(a, b)$ . Tal relação é fornecida pela normalização de  $|S_m+\rangle$  para que ele possa ser um elemento de  $\mathcal{H}$ :

$$\begin{aligned} a^2 + b^2 = 1 &\Rightarrow a^2 + \tan^2 \theta/2 a^2 = 1 \Rightarrow a^2 (1 + \tan^2 \theta/2) = 1 \\ &\Rightarrow a^2 \sec^2 \theta/2 = 1 \Rightarrow a^2 = \cos^2 \theta/2 \\ &\Rightarrow a = \pm \cos \theta/2, \quad b = \pm \sin \theta/2 \end{aligned}$$

Conseqüentemente, há duas soluções possíveis para  $|S_m+\rangle$ :

$$|S_m+\rangle = \pm \begin{pmatrix} \cos \theta/2 \\ \sin \theta/2 \end{pmatrix}$$

que como elementos de  $\mathcal{H}$  representam o mesmo estado, pois diferem apenas por uma fase. Portanto, novamente, sem perda de generalidade, podemos escolher apenas a solução positiva. Logo,

$|S_m + \rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta/2 \\ \sin \theta/2 \end{pmatrix}$  representa o autoestado associado a  $\lambda = \hbar/2$

2)  $|S_m - \rangle$ : procedendo exatamente como no caso anterior, temos que considerar o seguinte sistema L.D.:

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a \\ -b \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} a \cos \theta + b \sin \theta = -a \\ a \sin \theta - b \cos \theta = -b \end{cases}$$

Resolvendo a segunda equação:

$$a \sin \theta - b \cos \theta = -b \Rightarrow a = -\frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} b \Rightarrow a = -\tan \frac{\theta}{2} b$$

Da condição de normalização:

$$a^2 + b^2 = 1 \Rightarrow b^2 (1 + \tan^2 \theta/2) = 1 \Rightarrow b^2 = \cos^2 \theta/2$$

Escolhendo a solução positiva em virtude da invariância de fase, obtemos

$$|S_m - \rangle = \begin{pmatrix} -\sin \theta/2 \\ \cos \theta/2 \end{pmatrix} \text{ como o autoestado de } \lambda = -\hbar/2.$$

Note que os autovetores obtidos são **ortogonais**:

$$\begin{aligned} \langle S_m + | S_m - \rangle &= \left( \cos \frac{\theta}{2}, \sin \frac{\theta}{2} \right) \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = -\cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} + \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \\ &= 0 \end{aligned}$$

Portanto, o observável representado por  $S_m$  apresenta dois estados fisicamente distinguíveis  $|S_m \pm \rangle$  associados respectivamente às medições experimentais  $\pm \hbar/2$ . É esse fato que nos permite afirmar que  $S_m$  é um operador de

spin associado à orientação do aparato de SG ao longo do eixo determinado pelo vetor  $\mathbf{n}$ .

Suponhamos agora que do posse deste aparato  $S_{G\mathbf{n}}$  nos é fornecido um feixe de autoestados de  $S_z$  com spin  $+\hbar/2$ . Qual é a probabilidade de após uma medição de  $S_{\mathbf{n}}$  obtermos  $\hbar/2$ ? E  $-\hbar/2$ ?

Do AXIOMA 3 sabemos que  $P_{\pm} = |\langle \psi | S_{\mathbf{n}} \pm \rangle|^2$ , tomando

$\langle \psi | = \langle S_z + | = (1, 0)$  temos que

$$* P_+ = |\langle S_z + | S_{\mathbf{n}} + \rangle|^2 = |\cos \theta/2|^2 = \cos^2 \theta/2 \in [0, 1]$$

$$* P_- = |\langle S_z + | S_{\mathbf{n}} - \rangle|^2 = |\sin \theta/2|^2 = \sin^2 \theta/2 \in [0, 1]$$

Note que:

$$\sum_{\lambda \in \sigma(S_{\mathbf{n}})} P_{\lambda} = P_+ + P_- = \cos^2 \theta/2 + \sin^2 \theta/2 = 1$$

de acordo com o AXIOMA 3. Finalmente, podemos calcular o valor esperado de uma medição de  $S_{\mathbf{n}}$  em  $|S_z + \rangle$ ,

$$\begin{aligned} \langle S_{\mathbf{n}} \rangle &= \langle S_z + | S_{\mathbf{n}} | S_z + \rangle = \sum_{\lambda \in \sigma(S_{\mathbf{n}})} \lambda P_{\lambda} = \frac{\hbar}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} - \frac{\hbar}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \\ &= \frac{\hbar}{2} \cos \left( \frac{\theta}{2} + \frac{\theta}{2} \right) = \frac{\hbar}{2} \cos \theta \end{aligned}$$

que corresponde à projeção de  $\mathbf{n}$  ao longo do eixo  $\hat{O}_z$ .

Exercício 5.20: "Qual é o valor esperado de  $S_{\mathbf{n}}$  numa medição sobre um autoestado de  $S_z$  com autovalor  $-\hbar/2$ ? E sobre um autoestado arbitrário de  $S_x$ ?"

Nossa discussão sugere a seguinte formulação para o princípio de polarização do spin:

Princípio de polarização do spin: "Qualquer estado de um único spin é um autovetor de alguma componente do spin."

No jargão da física, dizemos que os estados de um spin são caracterizados por um **vetor de polarização**,  $\mathbf{n}$ , e ao longo deste vetor a componente do spin é necessariamente  $\hbar/2$ .

Uma consequência interessante do princípio de polarização do spin é que não existe um estado de spin para o qual o valor esperado de todas as três componentes do spin é nulo. É possível expressar esse fato de uma maneira quantitativa, para tanto consideramos o valor esperado do spin na direção  $\mathbf{n}$ . O princípio de polarização do spin, garante que

$$\exists |\psi\rangle \in \mathcal{H} \mid S_{\mathbf{n}} |\psi\rangle = \hbar/2 |\psi\rangle$$

Logo, para tal estado

$$\langle S_{\mathbf{n}} \rangle = \langle \psi | S_{\mathbf{n}} | \psi \rangle = \hbar/2$$

Por outro lado, o valor esperado das componentes perpendiculares a  $S_{\mathbf{n}}$  no estado  $|\psi\rangle$  é **zero**. Portanto, seus quadrados devem somar  $\hbar^2/4$ . Como, isso é verdade para  $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ , concluímos que:

$$\langle S_x \rangle^2 + \langle S_y \rangle^2 + \langle S_z \rangle^2 = \hbar^2/4.$$