

## MECÂNICA QUÂNTICA - AULA 6 - A MARCHA DO TEMPO

Necessitamos das últimas "quatro" aulas para desenvolver e formular de uma maneira matematicamente precisa o conceito de **estado quântico** e estabelecer de uma forma precisa a sua relação com as **medidas experimentais**. Contudo, assim como na MC conhecer o estado no qual um sistema se encontra é apenas metade do problema. A outra metade consiste em saber como tais estados mudam com a passagem do tempo. Este é o objetivo da presente aula.

### 6.1 - Memórias de uma Mecânica Clássica

Antes de nos aventurarmos na natureza quântica da marcha do tempo, é conveniente recordarmos como a passagem do tempo ocorre na MC. Clasicamente, o espaço de estados é simplesmente um **conjunto** dotado da lógica booleana e a evolução temporal dos estados é **determinística** e **reversível**. Nos dois exemplos simples que consideramos na primeira aula, a moeda e o d6, cujos espaços de estados correspondem respectivamente aos conjuntos:

$$S_2 = \{H, T\}, \quad S_6 = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\},$$

os estados eram visualizados como pontos e a lei de movimento como setas conectando-os.

Para que um certo grafo representasse uma lei de movimento clasicamente viável, vimos que ele deveria satisfazer dois requisitos:

- 1) **Determinismo**: o próximo estado deve ser univocamente determinado pela lei de movimento e pelo presente estado;
- 2) **Reversibilidade**: o estado anterior deve ser univocamente determinado pela lei de movimento e pelo presente estado.

Assim, uma boa lei de movimento clássica correspondia a um grafo, cujos pontos (estados) estão conectados por duas setas, uma chegando e a outra saindo.

Uma forma alternativa de se descrever tais requisitos consiste em demandar a conservação da informação. Dizer que a informação se conserva em um sistema, equivale a afirmar que se dois sistemas idênticos isolados estão inicialmente em estados distintos, permanecerão em estados distintos com a passagem do tempo. Por outro lado, se dois sistemas idênticos isolados estão em um dado instante no mesmo estado, então tanto seus passados quanto seus futuros são indistinguíveis.

## 6.2 - O Operador de Evolução Temporal

O objetivo desta seção é responder à seguinte questão:

"Como um estado quântico, representado por um ket evolui com o tempo?"

Considere um sistema quântico fechado com espaço de estados  $\mathcal{H}$  e suponha que em um dado instante de tempo  $t_0 \in \mathbb{R}$  o sistema se encontra no estado  $|\psi\rangle \equiv |\psi, t_0\rangle \in \mathcal{H}$ . Em geral, não esperamos que em instantes posteriores o sistema se mantenha no mesmo estado  $|\psi\rangle$ , denotemos, pois o ket representando o estado do sistema em um instante posterior  $t \in \mathbb{R}$  por:

$$|\psi(t)\rangle \equiv |\psi, t_0; t\rangle \in \mathcal{H}, \quad t > t_0.$$

onde escrevemos  $|\psi, t_0\rangle$  para lembrar que o sistema se encontrava no estado  $|\psi\rangle$  no instante de referência  $t_0$ .

Uma hipótese central da física é que os estados são funções contínuas do parâmetro temporal, ou seja, devemos ter que:

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\psi(t)\rangle = |\psi(t_0)\rangle = |\psi, t_0; t_0\rangle = |\psi, t_0\rangle = |\psi\rangle.$$

Queremos estudar como se dá a evolução temporal de um két:

$$|\psi\rangle = |\psi, t_0\rangle \xrightarrow{\text{evolução temporal}} |\psi, t_0; t\rangle = |\psi(t)\rangle.$$

Para tanto precisamos lançar mais de uma hipótese básica da dinâmica quântica, a saber, de que se soubermos o estado de um sistema num instante inicial  $t_0$ , as leis de movimento devem determinar em que estado o sistema se encontrará em um instante  $t$  posterior ( $t > t_0$ ). Dessa forma sabemos que a evolução temporal de um sistema quântico deve ser representada por um operador  $U(t, t_0)$ :  $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  linear e bijetor que satisfaça:

$$\mathcal{H} \ni |\psi(t)\rangle \equiv |\psi, t_0; t\rangle = U(t, t_0) |\psi, t_0\rangle \equiv U(t) |\psi\rangle \in \mathcal{H}$$

denominado operador de evolução temporal. Posteriormente, discutiremos outras propriedades importantes deste operador.

### 6.3 - Determinismo na MQ

Da forma que introduzimos o operador de evolução temporal, demandando sua bijetividade, estamos implicitamente exigindo que a evolução temporal dos ket's seja determinística e reversível. Claramente, tais propriedades são extremamente convenientes, por permitirem previsões sobre o futuro de um sistema quântico. Contudo, surge imediatamente um possível conflito com o caráter estatístico das medições quânticas.

Felizmente, tal contradição é apenas aparente. Sua resolução surge ao lembrar que o conhecimento do estado no qual um sistema quântico se encontra não permite que predizamos o resultado de uma única medição experimental. Por exemplo, saber que o sistema de dois níveis estudado no experimento de Stern-Gerlach se encontra no estado  $|S_x, +\rangle$  permite apenas que façamos previsões sobre medições de

$S\mathcal{G}_X$ , sem permitir nenhuma previsão sobre o resultado experimental de uma futura medição de  $S\mathcal{G}_Y$  ou  $S\mathcal{G}_Z$ . Consequentemente, a bijetividade do operador de evolução temporal  $U(t)$  não equivale ao determinismo clássico, já que o determinismo clássico envolve a predição dos resultados de medições experimentais. Por outro lado, a injetividade de  $U(t)$  permite a previsão das probabilidades de se obter um certo resultado experimental em futuras medições.

Esta é uma das diferenças mais profundas entre a MQ e a MC, que remonta à relação entre estados e medições experimentais. Ao passo que na MC não existe nenhuma diferença prática entre o estado do sistema e o resultado de uma medição experimental, na MQ tal diferença é gritante.

#### 6.4 - Propriedades do Operador de Evolução Temporal

Nesta seção estudamos quais propriedades adicionais devemos exigir do operador  $U(t, t_0) : \mathcal{S}\ell \rightarrow \mathcal{S}\ell$  linear e bijetor para que ele possa implementar a evolução temporal dos estados na MQ.

1) Conservação da informação: assim como na MC esperamos que a evolução temporal preserve as diferenças e semelhanças entre dois sistemas idênticos isolados. Seja um sistema com espaço de estados  $\mathcal{S}\ell$ , dois estados  $|\psi, t_0\rangle, |\varphi, t_0\rangle \in \mathcal{S}\ell$  são fisicamente distinguíveis se forem ortogonais, i.e.,

$$\langle \psi, t_0 | \varphi, t_0 \rangle = 0.$$

A conservação da informação implica que tais estados permanecerão fisicamente distintos ao longo do tempo, ou seja, continuaram ortogonais durante suas histórias,

$$\langle \psi, t_0; t | \varphi, t_0; t \rangle = 0, \forall t \in \mathbb{R}.$$

Por outro lado, estados idênticos devem permanecer indistinguíveis, i.e.,

$$|\psi, t_0\rangle = |\psi, t_0\rangle \Rightarrow |\psi, t_0; t\rangle = |\psi, t_0; t\rangle, \quad t > t_0.$$

Dessa forma, levando em conta que todos os elementos de  $\mathcal{H}$  são vetores unitários, temos que:

$$\langle \psi, t_0 | \psi, t_0 \rangle = 1 \Rightarrow \langle \psi, t_0; t | \psi, t_0; t \rangle = 1, \quad t > t_0.$$

Consequentemente, para os elementos de uma base orthonormal de  $\mathcal{H}$ ,

$$\mathcal{B} = \{ |\lambda_i\rangle \in \mathcal{H} \mid \langle \lambda_i | \lambda_j \rangle = \delta_{ij}, \forall i, j \in I \}$$

onde  $I \subseteq \mathbb{R}$  é algum conjunto não necessariamente contável, devemos ter

$$\langle \lambda_i, t_0 | \lambda_j, t_0 \rangle = \delta_{ij} \Rightarrow \langle \lambda_i, t_0; t | \lambda_j, t_0; t \rangle = \delta_{ij}, \quad t > t_0.$$

Logo,

$$\langle \lambda_i, t_0 | \lambda_j, t_0 \rangle = \delta_{ij} = \langle \lambda_i, t_0; t | \lambda_j, t_0; t \rangle = \langle \lambda_i, t_0 | U^*(t, t_0) U(t, t_0) | \lambda_j, t_0 \rangle$$

como os vetores  $|\lambda_i, t_0\rangle$ ,  $i \in I$  são elementos de uma base de  $\mathcal{H}$ , podemos concluir que a condição para o operador de evolução temporal

$$U^*(t, t_0) U(t, t_0) = \mathbb{I}, \quad t > t_0$$

é equivalente à conservação da informação.

A condição que acabamos de encontrar para o operador de evolução temporal é suficientemente parecida com a definição de **operador unitário**.

Definição 6.1: "Dizemos que um operador linear  $U: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  é **unitário** se  $U^* U = \mathbb{I} = U U^*$ ."

Assim, um operador unitário é aquele cuja inversa é dada pelo seu adjungo. Claramente, como  $U: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  é bijetor, existe a sua inversa  $U^{-1}$ , de forma que podemos demandar que  $U^* = U^{-1}$ , ou seja, que o operador de evolução temporal seja unitário.

2) Composição: a evolução temporal de um sistema por um intervalo de tempo  $T_1 = t_1 - t_0 \in \mathbb{R}$  seguida da evolução temporal do sistema resultante por um intervalo de tempo  $T_2 = t_2 - t_1 \in \mathbb{R}$ , deve ser equivalente à evolução temporal do sistema original por um intervalo de tempo  $T = T_2 + T_1 = t_2 - t_0 \in \mathbb{R}$ . Matematicamente, dizemos que a evolução temporal forma um semigrupo aditivo, ou seja, que

$$U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1) U(t_1, t_0).$$

Note que devemos ler a equação acima da direita para a esquerda, posto que é essa a ordem na qual os operadores atuam sobre um ket arbitrário.

3) Continuidade: concluímos anteriormente que a evolução temporal do estado de um dado sistema deve ser contínua, i.e.

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\psi, t_0; t\rangle = |\psi, t_0; t_0\rangle \equiv |\psi, t_0\rangle.$$

Precisamos encontrar quais são as condições impostas sobre o operador de evolução temporal por tal relação. Começemos rescrevendo a equação acima da seguinte forma:

$$\lim_{t \rightarrow t_0} [U(t, t_0) |\psi, t_0\rangle] = |\psi, t_0\rangle$$

Ou seja,  $\forall \epsilon > 0$  deve existir um  $\delta > 0$  tal que

$$\begin{aligned} |t - t_0| < \delta &\Rightarrow \|U(t, t_0) |\psi, t_0\rangle - |\psi, t_0\rangle\| < \epsilon \\ &\Rightarrow \|U(t, t_0) - 1\| |\psi, t_0\rangle < \epsilon \end{aligned}$$

Como tal relação é válida para qualquer  $|\psi, t_0\rangle \in \mathcal{H}$  concluimos que o operador de evolução temporal é contínuo como uma função do tempo e que

$$U(t_0, t_0) = 1.$$

Podemos combinar essa última conclusão com a propriedade de composição da

operador de evolução temporal, para inferirmos que:

$$\mathbb{1} = U(t_0, t_0) = U(t_0, t_1) U(t_1, t_0) \Rightarrow U(t_0, t_1) = U^{-1}(t_1, t_0)$$
$$\Rightarrow U(t_0, t_1) = U^*(t_1, t_0).$$

Note que a relação acima garante que a evolução temporal quântica é também **reversível**.

Com isso estabelecemos que o conjunto  $\{U(t, t_0) : \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{F}, t \in \mathbb{R}\}$  para algum  $t_0 \in \mathbb{R}$  fixo constitui um grupo com respeito à multiplicação operacional. Adicionalmente, como o operador  $U(t, t_0)$  é contínuo como uma função de  $t \in \mathbb{R}$ , dizemos que a evolução temporal é implementada por um **grupo uniparamétrico de operadores**.

## 6.5 - Equações de Schrödinger

Portanto, a partir de algumas simples considerações físicas foram levados à conclusão de que a evolução temporal na MQ é feita por um grupo uniparamétrico de operadores unitários. Contudo, dotados de tal conhecimento ainda somos incapazes de encontrar a lei dinâmica da MQ. De uma forma geral, estamos habituados a representar as leis de movimento na MC como equações diferenciais, e.g., a **2ª Lei de Newton**

$$F = \frac{dp}{dt}$$

cuja integração nos fornece as trajetórias no espaço de estados clássico. Assim, é natural que nossa primeira tentativa em descobrir uma equação de movimento na MQ seja por intermédio de equações diferenciais.

"Mas como obter tais equações diferenciais?"

A abordagem é baseada na idéia de mudança incremental no tempo. De uma forma mais concreta, consideraremos que um intervalo temporal finito pode ser construído

as combinarmos diversos intervalos infinitesimais de tempo. Procedendo deste modo deduzimos uma equação diferencial para a evolução temporal do vetor de estado.

O primeiro passo desta jornada consiste em encontrar a versão infinitesimal do operador de evolução temporal. Pongamos da seguinte Ansatz (de primeira ordem):

$$U(t_0 + \tau, t_0) = \mathbb{1} - i\Omega\tau + O(\tau^2)$$

onde  $\tau$  representa um intervalo de tempo infinitesimal e  $\Omega : D(\Omega) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  é algum operador linear. Verifiquemos que condições são impostas sobre  $\Omega$  para que tal  $U$  satisfaça as propriedades deduzidas na última seção.

1) Unitariedade: o operador  $U(t_0 + \tau, t_0)$  deve satisfazer:

$$U^*(t_0 + \tau, t_0) U(t_0 + \tau, t_0) = \mathbb{1} = U(t_0 + \tau, t_0) U^*(t_0 + \tau, t_0)$$

Começemos calculando  $U^*(t_0 + \tau, t_0)$

$$U^*(t_0 + \tau, t_0) = (\mathbb{1} - i\Omega\tau + O(\tau^2))^* = \mathbb{1} + i\Omega^*\tau + O(\tau^2)$$

pois  $\tau \in \mathbb{R}$  por se tratar de um intervalo de tempo. Logo,

$$\begin{aligned} U^*(t_0 + \tau, t_0) U(t_0 + \tau, t_0) &= (\mathbb{1} + i\Omega^*\tau)(\mathbb{1} - i\Omega\tau) + O(\tau^2) \\ &= \mathbb{1} + i\Omega^*\tau - i\Omega\tau + \Omega^*\Omega\tau^2 + O(\tau^2) \end{aligned}$$

Como nosso Ansatz corresponde a uma expansão (de Taylor) de primeira ordem no parâmetro infinitesimal  $\tau$ , devemos nos restringir durante todos os cálculos apenas até a primeira ordem, ou seja,

$$U^*(t_0 + \tau, t_0) U(t_0 + \tau, t_0) = \mathbb{1} + i(\Omega^* - \Omega)\tau + O(\tau^2)$$

Conseqüentemente, se exigirmos que  $\Omega : D(\Omega) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  seja **autoadjunto**,

i.e., que  $D(\Omega) = D(\Omega^*)$  e  $\Omega^* = \Omega$  concluiremos que:

$$U^*(t_0 + \tau, t_0) U(t_0 + \tau, t_0) = \mathbb{1} + O(\tau^2)$$

**Exercício 6.2:** "Verifique que nestas condições  $U(t_0 + \tau, t_0) U^*(t_0 + \tau, t_0) = \mathbb{1} + O(\tau^2)$ ."

Portanto, se o operador  $\mathcal{U}$  for auto adjunto, garantimos que o operador de evolução temporal infinitesimal dado pelo Ansatz acima é unitário.

2) Composição: queremos verificar se nosso Ansatz satisfaz:

$$U(t_0 + \tau_1 + \tau_2, t_0) = U(t_0 + \tau_1 + \tau_2, t_0 + \tau_1) U(t_0 + \tau_1, t_0)$$

Calculando, pois, o lado direito e matrizes que ele se reduz ao esquerdo:

$$\begin{aligned} & U(t_0 + \tau_1 + \tau_2, t_0 + \tau_1) U(t_0 + \tau_1, t_0) \\ &= [\mathbb{1} - i \mathcal{U} \tau_2 + O(\tau_2^2)] [\mathbb{1} - i \mathcal{U} \tau_1 + O(\tau_1^2)] \\ &= \mathbb{1} - i \mathcal{U} (\tau_2 + \tau_1) - \mathcal{U}^2 \tau_2 \tau_1 + O(\tau^2) \end{aligned}$$

Onde  $O(\tau^2)$  representa termos de ordem quadrática em nossos parâmetros infinitesimal  $\tau_1$  e  $\tau_2$ , ou seja, termos da forma  $\tau_1^2$ ,  $\tau_2^2$  e  $\tau_1 \tau_2$ . Logo,

$$\begin{aligned} U(t_0 + \tau_1 + \tau_2, t_0 + \tau_1) U(t_0 + \tau_1, t_0) &= \mathbb{1} - i \mathcal{U} (\tau_1 + \tau_2) + O(\tau^2) \\ &= U(t_0 + \tau_1 + \tau_2, t_0) \end{aligned}$$

Portanto, a propriedade de composição é trivialmente satisfeita por nosso Ansatz, sem impor nenhuma condição adicional.

3) Continuidade: precisamos verificar que o seguinte limite é satisfeito

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} U(t_0 + \tau, t_0) = \mathbb{1}$$

Claramente,

$$\begin{aligned} \lim_{\tau \rightarrow 0} U(t_0 + \tau, t_0) &= \lim_{\tau \rightarrow 0} [\mathbb{1} - i \mathcal{U} \tau + O(\tau^2)] \\ &= \mathbb{1} - i \mathcal{U} \lim_{\tau \rightarrow 0} \tau \xrightarrow{\tau \rightarrow 0} 0 + \lim_{\tau \rightarrow 0} O(\tau^2) \xrightarrow{\tau \rightarrow 0} 0 \\ &= \mathbb{1} \end{aligned}$$

como desejado e sem a imposição de nenhuma condição adicional.

Portanto, concluímos que o nosso Ansatz:

$$U(t_0 + \tau, t_0) = \mathbb{1} - i\omega\tau + O(\tau^2)$$

com  $\omega$  um operador autoadjunto satisfaz as propriedades da seção 6.4 e por isso devidamente constitui um operador de evolução temporal.

Naturalmente, nosso Ansatz é inútil ao menos que saibamos quem é o operador  $\omega$ . Podemos obter uma característica importante de tal operador ao analisarmos o nosso Ansatz dimensionalmente,

$$[\omega \cdot \tau] = 1 \Rightarrow [\omega] \cdot [\tau] = 1 \Rightarrow [\omega] = T^{-1}$$

ou seja, o operador  $\omega$  tem dimensão de **frequência**. Isso não resolve completamente o nosso problema, mas pelo menos sugere que provavelmente candidatos dentre os observáveis com dimensão de frequência. Sabemos da mecânica quântica velha que a **frequência angular**  $\nu$  está relacionada com a **energia**  $E$  através da **relação de Planck-Einstein**:

$$E = \hbar\nu$$

Adicionalmente, sabemos que na MC a hamiltoniana está relacionada com a energia total do sistema, bem como constitui o gerador das translações temporais. Portanto, é fisicamente plausível que relacionemos o operador  $\omega$  com o operador hamiltoniano

$H : D(H) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ , autoadjunto, da seguinte forma:

$$\omega = \hbar^{-1} H$$

Conseqüentemente, o operador de evolução temporal infinitesimal assume a seguinte forma:

$$U(t_0 + \tau, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i\tau}{\hbar} H$$

Estamos finalmente em condições de deduzir a equação diferencial que governa o comportamento do operador de evolução temporal  $U(t, t_0)$ . Começamos empregando a propriedade de composição para escrever:

$$U(t+\tau, t_0) = U(t+\tau, t) U(t, t_0)$$

$$= \left( \mathbb{I} - \frac{i\tau}{\hbar} H \right) U(t, t_0) + O(\tau^2)$$

onde a diferença  $t - t_0$  não precisa ser infinitesimal. Logo,

$$U(t+\tau, t_0) - U(t, t_0) = -\frac{i\tau}{\hbar} H U(t, t_0).$$

Consideramos, pois, o limite

$$\frac{U(t+\tau, t_0) - U(t, t_0)}{\tau} |\psi\rangle \xrightarrow{\tau \rightarrow 0} |\dot{\psi}\rangle \in \mathcal{H}, \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$$

na norma de  $\mathcal{H}$ , que define a derivada do operador  $U(t, t_0)$  em  $t = t_0$ :

$$\partial_t U(t, t_0) \Big|_{t=t_0} |\psi\rangle = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{U(t+\tau, t_0) - U(t, t_0)}{\tau} |\psi\rangle$$

com respeito à topologia induzida pela norma de  $\mathcal{H}$ . É um resultado geral que se  $U(t, t_0)$  é um elemento de um grupo uniparamétrico de operadores, então  $U(t, t_0)$  é infinitamente diferenciável (com respeito à topologia induzida pela norma de  $\mathcal{H}$ ) em um subespaço denso  $\mathcal{D} \subseteq \mathcal{H}$ . Portanto, se nos restringirmos a tal domínio denso, temos que:

$$i\hbar \partial_t U(t, t_0) = H U(t, t_0)$$

Essa é a famigerada equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal.

De posse de tal equação diferencial, podemos trivialmente obter a lei de evolução temporal para um vetor de estado  $|\psi, t_0\rangle \in \mathcal{D} \subseteq \mathcal{H}$  arbitrário,

$$[i\hbar \partial_t U(t, t_0)] |\psi, t_0\rangle = [H U(t, t_0)] |\psi, t_0\rangle$$

$$\Rightarrow i\hbar \partial_t [U(t, t_0) |\psi, t_0\rangle] = H [U(t, t_0) |\psi, t_0\rangle]$$

$$\Rightarrow i\hbar \partial_t |\psi, t_0; t\rangle = H |\psi, t_0; t\rangle$$

que é a equação de Schrödinger para um vetor de estado. Podemos finalmente postular

o último axioma da MQ.

Axioma 5: "Todo sistema físico (conservativo) é caracterizado por um operador linear autoadjunto  $H : D(H) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ , denominado operador hamiltoniano. A evolução temporal de um estado arbitrário do sistema em um dado instante de tempo  $t_0 \in \mathbb{R}$ ,  $|\psi, t_0\rangle \in D(H)$  é dada por

$$|\psi, t_0; t\rangle = U(t, t_0) |\psi, t_0\rangle$$

onde  $U(t, t_0)$  satisfaz a equação de Schrödinger:

$$i\hbar \partial_t U(t, t_0) = H U(t, t_0)$$

sujeito à condição inicial  $U(t_0, t_0) = \mathbb{I}$ .

## 6.6 - Soluções Formais da Equação de Schrödinger

Se conhecermos uma expressão explícita para  $U(t, t_0) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ , ou seja, se soubermos como o operador de evolução temporal depende de  $t \in \mathbb{R}$  e como ele atua sobre um estado arbitrário  $|\psi, t_0\rangle \in \mathcal{H}$ , não precisaremos resolver a equação de Schrödinger para o vetor de estado  $|\psi, t_0\rangle$ , basta que atuemos com  $U(t, t_0)$  sobre  $|\psi, t_0\rangle$  para obtermos o vetor de estado  $|\psi, t_0; t\rangle$  em um instante de tempo arbitrário  $t \in \mathbb{R}$ . Assim, nossa próxima tarefa será a de deduzir soluções formais da equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal. Consideraremos três casos que devem ser abordados separadamente.

Caso 1: Suponha que o operador hamiltoniano  $H : D(H) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ , linear e autoadjunto esteja definido em um subespaço denso  $D(H) \subseteq \mathcal{H}$  e que seja independente do parâmetro temporal  $t \in \mathbb{R}$ , ou seja, uma função constante a valores operacionais. Como vimos em breve, o hamiltoniano para a interação do momento magnético de spin com um campo magnético independente do

tempo é um exemplo deste caso. Então, os operadores:

$$U(t, t_0) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (t - t_0) H \right] := \int_{\sigma(H)} e^{-\frac{i}{\hbar} (t - t_0) \lambda} d\Pi_\lambda, \quad \forall t, t_0 \in \mathbb{R}$$

constituem um grupo uniparamétrico de operadores unitários em  $\mathcal{D}(H)$ . Este resultado é uma consequência imediata do teorema do cálculo funcional para operadores autoadjuntos, cuja demonstração está contida fora do escopo do presente curso. Provemos que tais operadores satisfazem a equação de Schrödinger:

$$i\hbar \partial_t U(t, t_0) = H U(t, t_0).$$

Para tanto, basta derivarmos tal  $U(t, t_0)$  com respeito ao tempo,

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t U(t, t_0) &= i\hbar \partial_t \left\{ \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (t - t_0) H \right] \right\} \\ &= i\hbar \partial_t \int_{\sigma(H)} e^{-\frac{i}{\hbar} (t - t_0) \lambda} d\Pi_\lambda \\ &= i\hbar \int_{\sigma(H)} \partial_t e^{-\frac{i}{\hbar} (t - t_0) \lambda} d\Pi_\lambda \\ &= i\hbar \left( -\frac{i}{\hbar} \right) \int_{\sigma(H)} \lambda e^{-\frac{i}{\hbar} (t - t_0) \lambda} d\Pi_\lambda \\ &= \left( \int_{\sigma(H)} \lambda d\Pi_\lambda \right) \left( \int_{\sigma(H)} e^{-\frac{i}{\hbar} (t - t_0) \mu} d\Pi_\mu \right) \\ &= H \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (t - t_0) H \right] \\ &= H U(t, t_0). \end{aligned}$$

Concluindo a demonstração de que tais  $U(t, t_0)$ , de fato, constituem operadores de evolução temporal.

CASO 2: Se o operador hamiltoniano  $H: \mathcal{D}(H) \subseteq \mathfrak{g}\ell \rightarrow \mathfrak{g}\ell$  for linear, autoadjunto e densamente definido no subespaço  $\mathcal{D}(H) \subseteq \mathfrak{g}\ell$ , mas depender do tempo de forma que os operadores para diferentes instantes de tempo,  $t_1 \neq t_2$ , comutem, i.e.,

$$H = H(t), \quad H(t_1) \neq H(t_2) \quad \text{mas} \quad [H(t_1), H(t_2)] := H(t_1)H(t_2) - H(t_2)H(t_1) = 0$$

então o operador de evolução temporal é dado por um elemento de um grupo uniparamétrico

unitário, da seguinte forma:

$$U(t, t_0) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' \right].$$

Um exemplo deste caso é dado pelo momento magnético de spin sujeito a um campo magnético cuja intensidade varia com o tempo, mas cuja orientação espacial é constante.

CASO 3: O operador hamiltoniano  $H: D(H) \rightarrow H$  linear, autoadjunto e densamente definido no subespaço  $D(H) \subseteq \mathcal{H}$  depende explicitamente do tempo e não comuta para instantes distintos de tempo,  $t_1 \neq t_2$ , i.e.,

$$H = H(t), \quad H(t_1) \neq H(t_2) \quad \text{e} \quad [H(t_1), H(t_2)] \neq 0.$$

Neste caso, o operador de evolução temporal é dado pela seguinte série:

$$U(t, t_0) = \mathbb{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) H(t_2) \cdots H(t_n),$$

conhecida como série de Dyson. Um exemplo de situação que demanda o uso de operadores de evolução temporal dados por séries de Dyson é aquela onde o momento de spin magnético interage com um campo magnético cuja direção também muda com o tempo.

Não nos preocuparemos em considerar os casos 2 e 3 em maiores detalhes, pois na aplicação elementares que estamos predominantemente interessados, apesar o caso 1 é relevante. Doravante, a menos que se mencione explicitamente o contrário, lidaremos apenas com hamiltonianos independentes do tempo.

## 6.7 - Autoestados de Energia

A forma do operador de evolução temporal associado a um hamiltoniano independente do tempo:

$$U(t, t_0) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (t - t_0) H \right] = \int_{\sigma(H)} e^{-\frac{i}{\hbar} (t - t_0) \lambda} d\Gamma_\lambda$$

simplifica-se significativamente quando o espectro do hamiltoniano coincide com o conjunto de seus autovalores, i.e.,

$$\sigma(H) = \{E_\lambda \in \mathbb{R} \mid H|\lambda\rangle = E_\lambda|\lambda\rangle, \lambda \in I\},$$

onde  $I \subseteq \mathbb{R}$  representa algum conjunto de índices e  $|\lambda\rangle \in D(H)$  são os autoestados de energia  $E_\lambda \in \mathbb{R}$ , relacionados entre si pela equação de Schrödinger independente do tempo,

$$H|\lambda\rangle = E_\lambda|\lambda\rangle.$$

Neste caso,

$$U(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H\right] = \sum_{\lambda \in I} e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_\lambda} |\lambda\rangle \langle \lambda|.$$

Consequentemente, para atuarmos com  $U(t, t_0)$  sobre um estado qualquer  $|\psi, t_0\rangle \in D(H)$  basta que saibamos a sua expansão na base de  $\mathcal{H}$  dada pelos autoestados do hamiltoniano  $H$ ,

$$|\psi, t_0\rangle = \sum_{\lambda \in I} |\lambda\rangle \langle \lambda| \psi, t_0\rangle = \sum_{\lambda \in I} \alpha_\lambda(t_0) |\lambda\rangle, \alpha_\lambda(t_0) := \langle \lambda | \psi, t_0\rangle.$$

Assim,

$$\begin{aligned} |\psi, t_0; t\rangle &= U(t, t_0) |\psi, t_0\rangle = \sum_{\lambda, \mu \in I} e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_\lambda} |\lambda\rangle \langle \lambda | \mu\rangle \alpha_\mu(t_0) \\ &= \sum_{\lambda \in I} e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_\lambda} \alpha_\lambda(t_0) |\lambda\rangle \\ &= \sum_{\lambda \in I} \alpha_\lambda(t) |\lambda\rangle \end{aligned}$$

onde os coeficientes da expansão na base de autoestados de energia dependentes do tempo são:

$$\alpha_\lambda(t_0) \xrightarrow[\text{temporal}]{\text{evolução}} \alpha_\lambda(t) = \alpha_\lambda(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_\lambda}.$$

Note que

$$|\alpha_\lambda(t)|^2 = \bar{\alpha}_\lambda(t) \alpha_\lambda(t) = \bar{\alpha}_\lambda(t_0) e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_\lambda} \alpha_\lambda(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_\lambda} = \bar{\alpha}_\lambda(t_0) \alpha_\lambda(t_0) = |\alpha_\lambda(t_0)|^2$$

ou seja, o módulo quadrado dos coeficientes da expansão permanecem constantes ao longo da evolução temporal. Contudo, as fases relativas entre componentes distintos da expansão variam com o tempo, pois as freqüências de oscilação são diferentes.

Um caso particularmente interessante ocorre quando o estado inicial coincide com um auto-

estado do hamiltoniano,

$$|\lambda, t\rangle = U(t, t_0) |\lambda\rangle = \sum_{\mu \in I} |\mu\rangle \langle \mu | \lambda\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_\mu} = |\lambda\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_\lambda}.$$

Portanto, se o sistema se encontra inicialmente em um autoestado do hamiltoniano do sistema, ele permanece neste estado indefinidamente. O máximo que pode ocorrer é uma variação da fase, correspondendo ao fator  $e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_\lambda}$ .

## 6.8 - Dependência Temporal dos Valores Esperados

O valor médio de um observável  $A: D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  é o mais próximo que temos na MQ de um resultado clássico. De fato, se a distribuição de probabilidades para o observável em questão for uma gaussiana que não é larga demais, então o valor esperado corresponde ao valor que se espera medir no laboratório. Se um sistema for grande e pesado o suficiente de forma que a MQ deixe de ser importante, então o valor médio de um observável se comporta quase exatamente de acordo com as equações de movimento da MC. Por esse motivo é extremamente importante sabermos como valores médios evoluem no tempo.

Suponha que no instante de tempo  $t \in \mathbb{R}$  o sistema seja descrito pelo estado  $|\psi, t_0; t\rangle \in \mathcal{H}$ . O valor esperado do observável  $A$  no instante  $t$  é

$$\langle A \rangle(t) = \langle \psi, t_0; t | A | \psi, t_0; t \rangle.$$

Para encontrarmos uma equação diferencial para  $\langle A \rangle(t)$ , diferenciamos com respeito ao tempo a equação acima

$$\partial_t \langle A \rangle(t) = \partial_t (\langle \psi, t_0; t | A | \psi, t_0; t \rangle) + \langle \psi, t_0; t | A \partial_t (\psi, t_0; t \rangle),$$

usando a equação de Schrödinger para os estados, obtemos

$$\begin{aligned} \partial_t \langle A \rangle(t) &= i/\hbar \langle \psi, t_0; t | H^* A | \psi, t_0; t \rangle - i/\hbar \langle \psi, t_0; t | A H | \psi, t_0; t \rangle \\ &= i/\hbar \langle \psi, t_0; t | [H, A] | \psi, t_0; t \rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \partial_t \langle A \rangle(t) = -\frac{i}{\hbar} \langle [A, H] \rangle$$

Portanto, a derivada temporal do valor médio do observável  $A$  está relacionada com o valor médio do observável  $-\frac{i}{\hbar} [A, H]$ . Naturalmente, se o hamiltoniano comutar com o observável  $A$ , i.e.,  $[H, A] = 0$ , teremos que:

$$\partial_t \langle A \rangle(t) = 0 \Rightarrow \langle A \rangle(t) = 0,$$

ou seja o valor médio de  $A$  é uma constante do movimento.

**Exercício 6.3:** "Demonstre que se os operadores  $A, B : D \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  são autoadjuntos, então o operador  $i[A, B] : D \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  também é autoadjunto."

Consideremos então o valor médio de um operador  $B : D \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  que não comuta com o hamiltoniano, assim violando uma das hipóteses do resultado acima. No entanto, se  $|\psi, t_0\rangle$  for um autoestado de  $H$ , temos ainda que:

$$\begin{aligned} \langle B \rangle(t) &= \langle \psi, t_0 | B | \psi, t_0 \rangle = \langle \psi, t_0 | U^*(t, t_0) B U(t, t_0) | \psi, t_0 \rangle \\ &= \langle \psi, t_0 | e^{\frac{i}{\hbar} E_H (t-t_0)} B e^{-\frac{i}{\hbar} E_H (t-t_0)} | \psi, t_0 \rangle = \langle \psi, t_0 | B | \psi, t_0 \rangle \\ &= \langle B \rangle(t_0), \end{aligned}$$

ou seja, que seu valor médio é também uma constante do movimento. É por esse motivo que autoestados de hamiltoniano são conhecidos como **estados estacionários**. A situação é mais interessante se considerarmos estados arbitrários dados por superposição de estados estacionários, ou seja, que possam ser não-trivialmente expandidos na base de autoestados de  $H$ :

$$|\psi, t_0\rangle = \sum_{\lambda \in I} \alpha_\lambda(t_0) |\lambda\rangle$$

Para os quais o valor médio de  $B$  é:

$$\begin{aligned} \langle B \rangle(t) &= \langle \psi, t_0 | U^*(t, t_0) B U(t, t_0) | \psi, t_0 \rangle \\ &= \left[ \sum_{\lambda \in I} \bar{\alpha}_\lambda(t_0) \langle \lambda | e^{\frac{i}{\hbar} (t-t_0) E_\lambda} \right] B \left[ \sum_{\mu \in I} e^{-\frac{i}{\hbar} (t-t_0) E_\mu} \alpha_\mu(t_0) | \mu \rangle \right] \end{aligned}$$

$$= \sum_{\lambda, \mu \in I} \bar{\alpha}_\lambda(t_0) \alpha_{\mu}(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)(E_\mu - E_\lambda)} \langle \lambda | B | \mu \rangle.$$

Assim, neste caso, o valor médio consiste de uma soma de termos oscilantes, cujas freqüências são:

$$\omega_{\mu\lambda} := \hbar^{-1} (E_\mu - E_\lambda)$$

que corresponde à condição de freqüência de Niels Bohr.

### 6.9 - Quantidades Conservadas na MQ

Nossa discussão anterior nos ensinou que uma condição necessária e suficiente para que o valor médio de um observável  $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  com respeito a um estado arbitrário  $|\psi\rangle \in D(A)$  seja independente do tempo é que

$$[A, H] = 0,$$

onde  $H : D(H) \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  é o hamiltoniano do sistema e supomos que tenhamos restringido os domínios de forma que  $D(A) = D(H)$ . A condição de que o valor médio  $\langle A \rangle$  não varie com o tempo é um requisito mínimo para podermos afirmar que o observável  $A$  é uma quantidade conservada. De uma forma mais geral, para dizermos que um observável é uma quantidade conservada devemos exigir que o valor médio de qualquer de suas potências,  $\langle A^n \rangle$ ,  $n \in \mathbb{N}$  não dependa do tempo.

**Exercício 6.4:** "Sejam  $A : D \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  e  $H : D \subseteq \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  um observável arbitrário e o hamiltoniano de um dado sistema. Demonstre que  $[A^n, H] = 0$ ,  $\forall n \in \mathbb{N}$ , se  $[A, H] = 0$ ."

Portanto, se um observável  $A$  comutar com o hamiltoniano  $H$  de um sistema, o valor médio de todas as funções de  $A$  são constantes do movimento. Dizemos neste caso, pois, que o observável  $A$  constitui uma quantidade conservada na MQ.

O exemplo mais imediato de uma quantidade conservada para um sistema quântico arbitrário é o próprio hamiltoniano do sistema se este não depender do tempo, pois

$$[H, H] = 0.$$

Como o hamiltoniano é o observável associado à energia do sistema, concluímos sob condições bem gerais que a energia é conservada na MQ.

## 6.10 - Spin em um Campo Magnético

Nesta seção ilustraremos o formalismo desenvolvido para a evolução temporal de sistemas quânticos no nosso exemplo favorito: o sistema de dois níveis dados pelo spin do elétron de valência de um átomo de prata no experimento de Stern-Gerlach. Nossa primeira tarefa consiste em encontrar um operador hamiltoniano que descreva a interação entre o spin e o campo magnético externo. De uma forma geral não existe uma receita fechada para se encontrar o hamiltoniano desejado. Para isso, precisamos muitas vezes recorrer a diversas fontes tanto experimentais quanto teóricas, podendo envolver até abordagens de tentativa e erro.

Felizmente para o caso em consideração não temos muitas opções. Uma primeira tentativa seria formar o hamiltoniano proporcional à identidade

$$H \sim \mathbb{1}.$$

Contudo, como a identidade comuta com qualquer operador, numa teoria cujo hamiltoniano é proporcional à identidade, nada iria mudar com o tempo. Levando-nos, pois, a descartar essa opção. A única outra possibilidade que temos que preserva a isotropia do espaço consiste em considerar o hamiltoniano proporcional a uma soma envolvendo todas as componentes do spin ponderadas pelas respectivas componentes do campo magnético:

$$H \sim S_x B_x + S_y B_y + S_z B_z = \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}.$$

Verifica-se experimentalmente que tal fator de proporcionalidade é  $-\frac{e}{m_e c}$  (no CGS, em conformidade com a nossa discussão na primeira unidade),  $e < 0$ . Portanto,

$$H = -\frac{e}{m_e c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}.$$

Consideremos o caso mais simples no qual o campo magnético é estacionário, uniforme e ao longo do eixo  $\hat{O}_z$ , de forma que o hamiltoniano se simplifica a:

$$H = -\frac{eB}{m_e c} S_z.$$

Claramente, por diferença apenas por uma constante multiplicativa real:  $D(H) = D(S_z)$ ,  $H = H^*$  e  $[H, S_z] = 0$ . Consequentemente, os autoestados de  $S_z$  também são autoestados de energia cujos autovalores correspondem a:

$$E_{\pm} = \mp \frac{e\hbar B}{2m_e c}, \text{ para } |S_z \pm\rangle.$$

Exercício 6.5: "Demonstre esse fato."

É conveniente introduzir a quantidade:

$$\omega := \frac{|e|B}{m_e c}$$

de forma que a diferença entre os dois autovalores da energia seja  $\hbar\omega$ . Neste caso, o hamiltoniano assume a seguinte forma:

$$H = \omega S_z$$

Como o hamiltoniano é independente do tempo, estamos no Caso 1, para o qual o operador de evolução temporal é:

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H} = e^{-\frac{i}{\hbar}\omega(t-t_0)S_z}.$$

Logo, para obtermos  $|\psi, t\rangle$  basta que apliquemos tal  $U(t, t_0)$  sobre um estado arbitrário  $|\psi, t_0\rangle \in \mathcal{H}$ . Tomando sem perda de generalidade  $t_0 = 0$ , expandimos  $|\psi\rangle \equiv |\psi, t_0 = 0\rangle$  na base de autoestados de  $S_z$ , que coincide com a base de autoestados de energia:

$$|\psi\rangle = \alpha_+ |S_z +\rangle + \alpha_- |S_z -\rangle.$$

Lembrando que:

$$H |S_z \pm\rangle = \pm \frac{\hbar\omega}{2} |S_z \pm\rangle,$$

concluímos que a ação de  $U(t, 0)$  sobre  $|\psi\rangle$  é:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, 0)|\psi\rangle = \alpha_+ e^{-\frac{i\omega t}{2}} |S_z+\rangle + \alpha_- e^{\frac{i\omega t}{2}} |S_z-\rangle.$$

Estudemos explicitamente alguns casos particulares do vetor de estado  $|\psi(t)\rangle$ .

1) O estado inicial corresponde ao de spin para cima,  $|\psi\rangle = |S_z+\rangle$ , ou seja,

$$\alpha_+ = 1 \quad \text{e} \quad \alpha_- = 0.$$

Logo,

$$|\psi(t)\rangle = |S_z+(t)\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}} |S_z+\rangle.$$

Assim, confirmando a nossa conclusão anterior de que autoestados de energia são estacionários.

2) O estado inicial corresponde ao de spin para a direita,  $|\psi\rangle = |S_x+\rangle$ , ou seja,

$$\alpha_+ = \alpha_- = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Logo,

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{-\frac{i\omega t}{2}} |S_z+\rangle + e^{\frac{i\omega t}{2}} |S_z-\rangle].$$

Calulemos, pois, as probabilidades de encontrarmos o sistema em  $|S_x\pm\rangle$  após um intervalo de tempo  $t$ ,

$$\begin{aligned} |\langle S_x \pm | \psi(t) \rangle|^2 &= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle S_z+ | \pm \langle S_z- |] \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{-\frac{i\omega t}{2}} |S_z+\rangle + e^{\frac{i\omega t}{2}} |S_z-\rangle] \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{2} [e^{-\frac{i\omega t}{2}} \pm e^{\frac{i\omega t}{2}}] \right|^2 \\ &= \begin{cases} \cos^2 \frac{\omega t}{2}, & \text{para } |S_x+ \rangle \\ \sin^2 \frac{\omega t}{2}, & \text{para } |S_x- \rangle \end{cases} \end{aligned}$$

Portanto, apesar de termos preparado o sistema originalmente em um autoestado positivo de  $S_{Gx}$ , o campo magnético ao longo do eixo  $\hat{O}_z$  faz com que o spin rote, propiciando uma probabilidade não nula de encontrarmos o sistema em  $|S_x-\rangle$  algum tempo  $t$  depois. Note, contudo, que a soma

das duas probabilidades é sempre 1, de acordo com a unitariedade do operador de evolução temporal.

Similarmente, podemos calcular o valor médio de  $S_x$  com respeito ao estado  $|\Psi(t)\rangle$ ,

$$\begin{aligned}\langle S_x(t) \rangle &= \langle \Psi(t) | S_x | \Psi(t) \rangle \\ &= \sum_{\lambda, \mu \in I} \bar{a}_\lambda a_\mu \langle \lambda | S_x | \mu \rangle \exp \left[ -i \frac{(E_\mu - E_\lambda)t}{\hbar} \right]\end{aligned}$$

Usando o resultado obtido anteriormente,

$$\langle S_z \pm | S_x | S_z \pm \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle S_z \pm | S_x | S_z \mp \rangle = \hbar/2$$

temos que:

$$\begin{aligned}\langle S_x(t) \rangle &= \frac{1}{2} \cdot \frac{\hbar}{2} (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) \\ &= \frac{\hbar}{2} \cos \omega t.\end{aligned}$$

Uma forma alternativa de obter o valor esperado acima, consiste em usar as probabilidades que calculamos anteriormente em conjunto com o Axioma 3:

$$\begin{aligned}\langle S_x \rangle &= \sum_{\lambda \in \sigma(S_x)} \lambda P_\lambda = \frac{\hbar}{2} \cos^2 \frac{\omega t}{2} + \left(-\frac{\hbar}{2}\right) \sin^2 \frac{\omega t}{2} \\ &= \frac{\hbar}{2} \cos \omega t.\end{aligned}$$

Consequentemente, o valor esperado  $\langle S_x \rangle$  oscila com freqüência angular correspondente à diferença entre as duas autoenergias dividida por  $\hbar$ . Analogamente, concluímos que os valores médios dos demais operadores de spin,  $S_y$  e  $S_z$ , são:

$$\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \omega t.$$

$$\langle S_z \rangle = 0$$

Exercício 6.6: "Verifique que as expressões dadas acima para  $\langle S_y \rangle$  e  $\langle S_z \rangle$  estão corretas."

Fisicamente, nossos resultados podem ser interpretados da seguinte forma. O spin de um sistema sujeito a um campo magnético ao longo do eixo  $O_z$  inicialmente representado pelo estado  $|\Psi, t_0=0\rangle = |S_x+\rangle$  precessiona no plano  $\hat{O}xy$ .

Mostraremos a seguir que a precessão do spin no plano Oxy observada no caso onde o estado inicial corresponde a  $|4, t_0 = 0\rangle = |S_x +\rangle$  é um fenômeno geral que ocorre sempre que o valor de expectativa inicial de  $S_x$  ou  $S_y$  for não nulo. Para tanto, invocamos a equação que deduzimos para a evolução temporal de um valor médio com respeito a um estado arbitrário:

$$\partial_t \langle A \rangle(t) = -\frac{i}{\hbar} \langle [A, H] \rangle.$$

Substituindo o hamiltoniano para a interação entre o spin e um campo magnético ao longo do eixo  $\hat{O}_z$ :

$$H = \omega S_z = \frac{\hbar \omega}{2} \sigma_z,$$

obtemos que:

$$\partial_t \langle A \rangle(t) = -\frac{i\omega}{2} \langle [A, \sigma_z] \rangle.$$

Escolhendo o observável A como as componentes do spin:

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x, \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y \quad \text{e} \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z$$

temos que:

$$\partial_t \langle S_j \rangle(t) = -\frac{i\hbar\omega}{4} \langle [\sigma_j, \sigma_z] \rangle, \quad j = x, y, z.$$

Neste momento invocamos as relações de comutação entre as matrizes de Pauli:

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z,$$

$$[\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x,$$

$$[\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y.$$

Exercício 6.7: "Verifique as relações de comutação acima."

De forma que as equações de movimento para os valores esperados ficam:

$$\begin{aligned} \partial_t \langle S_x \rangle(t) &= -\frac{i\hbar\omega}{4} \langle [\sigma_x, \sigma_z] \rangle = -\frac{i\hbar\omega}{4} (-2i) \langle \sigma_y \rangle = -\omega \langle \frac{\hbar}{2} \sigma_y \rangle \\ &= -\omega \langle S_y \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\partial_t \langle S_y \rangle(t) &= -\frac{i\hbar\omega}{4} \langle [\sigma_y, \sigma_z] \rangle = -\frac{i\hbar\omega}{4} 2i \langle \sigma_x \rangle = \omega \langle \frac{\hbar}{2} \sigma_x \rangle \\ &= \omega \langle S_x \rangle, \\ \partial_t \langle S_z \rangle(t) &= -\frac{i\hbar\omega}{4} \langle [\sigma_z, \sigma_z] \rangle \\ &= 0.\end{aligned}$$

Tais equações mostram que o vetor tridimensional

$$\langle \vec{S} \rangle = (\langle S_x \rangle, \langle S_y \rangle, \langle S_z \rangle)^T \in \mathbb{R}^3$$

precessa como um giroscópio ao redor da direção do campo magnético. A precessão é uniforme com velocidade angular  $\omega$ . O valor médio de  $S_z$  permanesse constante, enquanto que as das demais componentes oscilam como no exemplo considerado anteriormente. Note, contudo, que as medições individuais de cada componente continuam sendo elementos de seus espectros, ou seja,  $\pm \hbar/2$ .

## 6.11 - Colapso

Aprendemos nesta aula como um vetor de estado evolui no tempo entre a preparação do sistema (nesse estado) e o momento da medição experimental, quando o sistema interage com o aparelho experimental. Se o vetor de estado fosse a quantidade fisicamente mensurável, poderíamos dizer que a MQ é uma teoria determinística. Contudo, as quantidades que não são experimentalmente acessíveis são observáveis. Portanto, mesmo que saibamos o vetor de estado exatamente, não conseguiríamos prever o resultado de nenhum experimento. No entanto, é correto afirmar que entre medições o estado de um sistema evolui de uma forma univocamente definida pela equações de Schrödinger.

Dessa forma, algo diferente ocorre quando uma medição é feita. Um experimento desenhado para medir o observável A terá um resultado imprevisível e após a medição deixará o sistema

em algum autoestado de  $A$ , aquele correspondendo ao "autoválor" medido. Consequentemente, durante uma medição experimental o sistema pula de uma forma imprevisível para algum autoestado do observável sob medição. Esse fenômeno é denominado **colapso da função de onda**.

Posto de outro modo, se o sistema se encontrava no estado

$$|\psi\rangle = \sum_{i \in I} \alpha_i |\lambda_i\rangle \in D(A) \subseteq \mathbb{H}$$

antes da medição do observável  $A$ . Então, aleatoriamente com uma probabilidade  $|\alpha_i|^2$  mediremos o valor  $\lambda_j$  e o estado do sistema colapsará para aquele autoestado de  $A$  com autoválor  $\lambda_j$ , a saber  $|\lambda_j\rangle$ .

Esse estranho fato, de que o sistema evolui de uma forma (determinística) entre medições, e outra forma (aleatória) completamente distinta durante as medições, tem sido uma constante fonte de confusão por levantar a seguinte questão:

"**Não deveríamos descrever as medições experimentais pelas mesmas leis da MQ?**"

A resposta é, naturalmente, sim. As leis da MQ não são suspensas durante o processo de medição experimental. Contudo, para podermos analisar o processo de medição experimental do ponto de vista da evolução temporal quântica, devemos considerar tanto o sistema sob observação quanto o próprio aparato experimental como parte de um único sistema quântico. Para tanto precisaremos aprender como combinar sistemas simples em um sistema mais complexo.