Mecânica Quântica I (FI-001)

Amir O. Caldeira

10 de Março de 2022

1 Conceitos Básicos

I.1) A função de onda e a experiência de Young

Até, praticamente, as últimas décadas do século XIX, os fenômenos físicos podiam ser entendidos através da mecânica newtoniana e do eletromagnetismo de Maxwell. A luz, em particular, era um exemplo do fenômeno ondulatório previsto pelas equações de Maxwell. Entretanto, ao longo do 1º quarto do século XX, um conjunto de experiências demonstrou que o tratamento clássico, tanto da luz quanto do movimento de partículas massivas, não era adequado para explicar os resultados experimentais obtidos na época.

A fim de explicar o que era observado em experiências como: a radiação do corpo negro, o efeito fotoelétrico, as raias do espectro do átomo de hidrogênio, o efeito Compton e a difração eletrônica de Davisson e Germer, lançou-se mão das seguintes hipóteses:

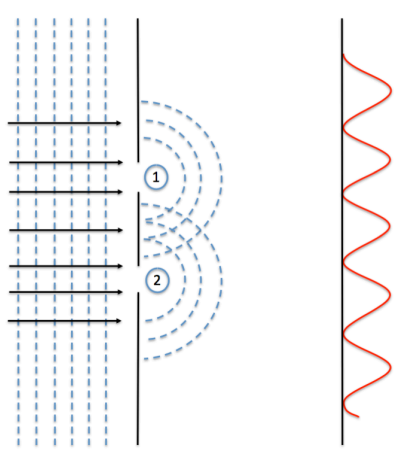
1. A luz é constituída de pacotes de energia $h\nu$ e o momento linear $p = h/\lambda$ ($h = 6.62 \times 10^{-34}$ J.s é a constante de Planck), os chamados *fótons*. Esta é a *hipótese de Einstein*.

2. A matéria apresenta comportamento ondulatório com comprimento de onda $\lambda = h/p$ e frequência E/h. Esta é a *hipótese de de Broglie*.

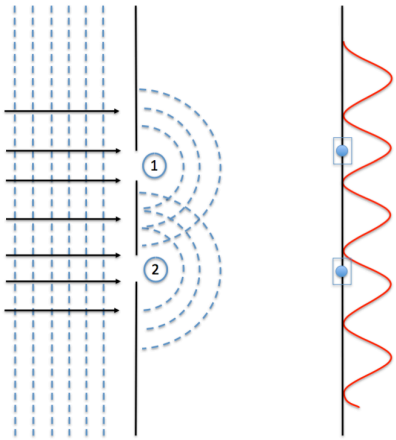
Estas duas características nos levam, por exemplo, ao fato de a matéria absorver ou emitir radiação eletromagnética em quantidades discretas pois elas preveem, entre outros resultados, a existência de órbitas atômicas estáveis e discretas (níveis de energia). Como, então, conciliar as teorias ondulatória e corpuscular da radiação e da matéria?

Vamos analisar um fenômeno tipicamente ondulatório em termos de fótons. Consideremos a experiência de Young em 3 situações distintas:

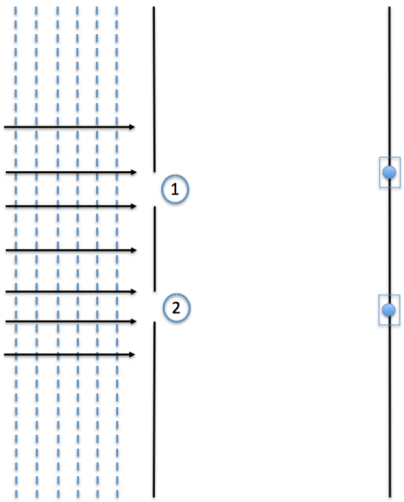
a) Feixe de luz intenso $\Rightarrow$ figura de interferência da intensidade luminosa detetada no anteparo.



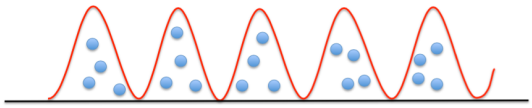
b) Feixe de luz + detetor no anteparo ⇒ figura de interferência da intensidade luminosa, mas contagem discreta da chegada dos fótons, apesar de muitos deles por unidade de tempo.



c) Feixe de luz não intenso + detetor no anteparo ⇒ se, por exemplo, 1 fóton atravessa a fenda dupla por segundo, 1 fóton por segundo é registrado em um detetor localizado em algum ponto do anteparo.



No decorrer de um longo intervalo de tempo o resultado acumulado é uma figura de interferência!

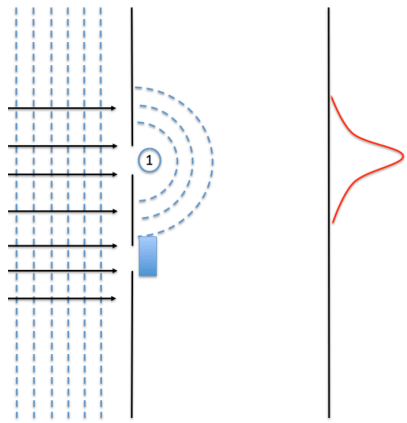


O resultado do feixe c) é compatível com o de N experiências ($N \gg 1$) de 1 fóton, identicamente preparadas e totalmente descorrelacionadas. Depois de realizadas (fótons detetados), sobrepõem-se os N anteparos atingidos em pontos diferentes (mas, cada um em apenas um ponto) e o resultado é um histograma em forma de interferência.

Uma pergunta imediata é: "por onde passou o fóton?"

Para responder esta pergunta podemos repetir a mesma experiência fechando uma das fendas.

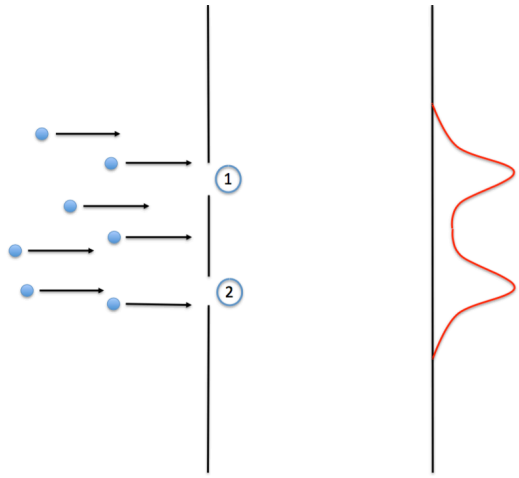
O resultado é que a figura de interferência é destruída. Portanto, ao tentarmos descrever os fótons através de trajetórias de partículas clássicas destruímos a figura de interferência.



Portanto, a informação adquirida de por onde passou o fóton fez com que o processo de interferência de alternativas não mais ocorresse.

É exatamente o processo de interferência de alternativas que está na base da formulação da mecânica quântica.

Ao lançarmos *partículas clássicas* sobre duas fendas obtemos o resultado abaixo;



o que é compatível com uma simples adição das intensidades dos feixes oriundos das fendas 1 e 2: $I = I_1 + I_2 \Rightarrow$ não há interferência.

Podemos, então, esboçar o seguinte raciocínio na tentativa de motivar a solução deste problema (cuidado! ver comentário na pág.4). A intensidade no anteparo é dada por $I(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})c$ onde $U(\mathbf{r})$ é a densidade de energia da radiação eletromagnética (EM) dada por $E^2(\mathbf{r})/8\pi$ e c a sua velocidade de propagação. Se a radiação é composta

por N fótons, a sua energia é $Nh\nu$. Consideremos, então, o campo elétrico $E(\mathbf{r})$ (apenas uma componente do campo é suficiente para a nossa argumentação) associado à presença de apenas 1 fóton (veja comentário abaixo). Através dele podemos definir uma densidade de probabilidade de se encontrar o fóton em um ponto $\mathbf{r}$ como

$$\rho(\mathbf{r}) \equiv \frac{E^2(\mathbf{r})}{8\pi h\nu}$$

pois $\int \rho(\mathbf{r}) d^3r = 1$.

Por outro lado, sabemos que o campo na placa é dado pela superposição dos campos gerados nas fendas 1 e 2, respectivamente, como $E(\mathbf{r}) = E_1(\mathbf{r}) + E_2(\mathbf{r})$. Assim, se definirmos

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{1}{8\pi h\nu}} E(\mathbf{r})$$

temos

$$\psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \frac{|E|^2}{8\pi h\nu}$$

onde assumimos que $\psi(\mathbf{r})$ pode ser complexo. Desta forma

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_1(\mathbf{r}) + \psi_2(\mathbf{r}) \Rightarrow |\psi|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2\mathrm{Re}(\psi_1\psi_2^*) = \frac{1}{8\pi h\nu}\{|E_1|^2 + |E_2|^2 + \underbrace{2\mathrm{Re}(E_1E_2^*)}_{interferência!}\}$$

O objeto principal da teoria passa a ser $\psi(\mathbf{r})$ tal que $\rho(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2$ é a probabilidade (densidade de probabilidade) de se encontrar 1 fóton no ponto $\mathbf{r}$ e $\psi(\mathbf{r})$ é a *amplitude de probabilidade* correspondente, a informação máxima que podemos ter sobre o fóton. Este é criado como uma partícula, absorvido no anteparo como uma partícula, mas entre estes eventos só podemos descrevê-lo através de $\psi(\mathbf{r})$.

No caso de partículas clássicas, $\rho(\mathbf{r}) = \rho_1(\mathbf{r}) + \rho_2(\mathbf{r})$, ou seja, $P(A \cup B) = P(A) + P(B)$ onde o evento A é passar por 1 e B por 2. No caso de fótons temos que primeiro somar as amplitudes (superposição) para depois tomar o seu quadrado.

$$\Rightarrow \rho(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2$$

onde

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_1(\mathbf{r}) + \psi_2(\mathbf{r})$$

o que evidencia a profunda diferença entre os casos clássico e quântico. Portanto, a interferência se dá entre as amplitudes de probabilidade $\psi_1(\mathbf{r})$ e $\psi_2(\mathbf{r})$.

Comentário importante: Convém enfatizar neste ponto que a proporcionalidade entre $\psi(\mathbf{r})$ e $E(\mathbf{r})$ é apenas de caráter operacional. $E(\mathbf{r})$ é um campo elétrico, uma variável clássica cuja dinâmica é regida pelas equações de Maxwell. Já $\psi(\mathbf{r})$ é uma função criada para conciliar os resultados da experiência da fenda dupla para ondas e partículas. A sua interpretação é probabilística e poderíamos postulá-la sem qualquer menção ao campo $E(\mathbf{r})$. Na realidade, nem faz sentido definirmos um campo clássico no caso de poucos fótons (N fixo e $\mathcal{O}(1)$). Portanto, bastaria impor o princípio de superposição para a função $\psi(\mathbf{r})$ e sua interpretação probabilística

$$\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d^3r = 1.$$

Esta função é o que representa o estado da partícula numa teoria quântica. Existe sim, uma relação entre um campo clássico e a função de onda que descreve o estado quântico do campo de radiação[1], que é obtida através de um campo genuinamente quântico. Este campo quântico ainda pode ser relacionado com a função $\psi(\mathbf{r})$ que descreve o estado físico do quantum[2] a ele associado. Estes são tópicos relacionados com a *teoria quântica de campos*, o que não trataremos explicitamente neste curso.

Como já mencionamos anteriormente, de Broglie postulou a existência de ondas de matéria e esta hipótese foi confirmada por Davisson e Germer no famoso experimento da difração eletrônica por materiais cristalinos. Tudo o

[1] Estado coerente de campo de radiação (fase fixa).
[2] Estado de 1 fóton (número fixo).

que foi visto nos casos a), b) e c) para fótons aplica-se para elétrons ou qualquer outra partícula atômica. Assim, podemos postular diretamente $\psi(\mathbf{r})$ com as mesmas propriedades que definimos para os fótons. Esta função, a que chamaremos de *função de onda*, representa o estado físico dos elétrons (ou prótons ou nêutrons). Esta é a informação máxima que temos sobre a partícula entre a fonte de onde é emitida e o anteparo onde é absorvida.

A grande diferença entre os fótons e os elétrons (ou qualquer outra partícula elementar massiva) é que os primeiros surgiram como os quanta da radiação EM - um campo classicamente observável - o que não acontece com as partículas massivas. Uma pergunta inevitável é se existe um campo de matéria, ou seja, o que estaria para uma partícula massiva assim como a radiação EM está para o fóton. A resposta é sim, porém, se este campo pode ser descrito (e observado) classicamente é uma questão ainda em aberto e depende da "partícula" considerada. No caso dos elétrons, por exemplo, este campo é complexo (ao contrário do campo EM) e genuinamente quântico [3].

A nossa conclusão sobre tudo o que foi dito até o momento é que, dada uma partícula atômica ou um fóton, podemos descrevê-la através de uma função de onda $\psi(\mathbf{r})$ cuja interpretação é que $|\psi(\mathbf{r})|^2$ representa a densidade de probabilidade de encontrá-la no ponto $\mathbf{r}$. Assim, as propriedades ondulatória e corpuscular coexistem: este é o princípio da *dualidade onda-partícula*. Entretanto, não há nenhuma forma de estas duas propriedades serem testadas simultaneamente. Ou fazemos um esquema de medida onde o aspecto corpuscular seja evidenciado ou um que revele o caráter ondulatório do sistema em questão. Este é o *princípio da complementaridade*, que ficou bem claro na experiência de Young.

Como postulamos, $\psi(\mathbf{r})$ é uma função que descreve uma onda. Por outro lado, sabemos que independentemente da origem do fenômeno ondulatório ele é sempre regido por uma dada evolução temporal para que, dadas as condições iniciais condizentes com o problema físico, possamos determinar o elemento básico $\psi(\mathbf{r},t)$ no instante t. Para descrevermos o resultado da experiência de Young, para fótons ou partículas massivas, basta assumir a forma

$$\psi(\mathbf{r},t) = \psi_0 e^{i\,(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \tag{1}$$

onde $\omega = \omega(\mathbf{k})$.

Com o auxílio das relações de Planck-Einstein-de Broglie temos

$$\begin{aligned} E = h\nu = \hbar\omega \ (\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}), \\ |\mathbf{p}| = \frac{h}{\lambda} = \hbar|\mathbf{k}| \ \Rightarrow \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \end{aligned} \tag{2}$$

No caso de fótons $\omega = c|\mathbf{k}|$ enquanto que para partículas massivas

$$E = \frac{p^2}{2m} \ \Rightarrow \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \text{ ou } \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}.$$

Neste ponto poderíamos tentar criar uma equação que descrevesse a evolução temporal de $\psi(\mathbf{r},t)$ mas há várias conclusões a que podemos chegar mesmo antes de ter a sua forma explícita. Deixaremos a sua obtenção para mais tarde.

O resultado da experiência de Young nos mostrou que num ponto do espaço a partícula pode ser encontrada numa superposição de ondas planas,

$$\psi(\mathbf{r},t) = \psi_1(\mathbf{r},t) + \psi_2(\mathbf{r},t).$$

Podemos generalizar este conceito e criar o que chamamos de pacotes de onda como

$$\psi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p\, \tilde{\psi}(\mathbf{p})\, e^{i/\hbar\,(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}\,-\,E(\mathbf{p})\,t)} \tag{3}$$

onde $(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}$ garante que

$$\int |\psi(\mathbf{r},t)|^2 d^3r = \int |\psi(\mathbf{p},t)|^2 d^3p = 1 \tag{4}$$

onde

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p},t) = \tilde{\psi}(\mathbf{p})\, e^{-i\,\frac{E}{\hbar}t}.$$

[3] Outro ponto de vista é assumir a existência de quanta corpusculares nos dois casos, com ou sem massa, e obter os campos como estados particulares contendo um grande número (a rigor, indefinido) de partículas. Neste caso, nem mesmo o campo EM poderia ser considerado fundamental. Entretanto, mesmo nesta descrição não se está livre de controvérsias.

A interpretação probabilística de $\psi(\mathbf{r},t)$ nos leva imediatamente ao conceito de valores médios de determinadas variáveis. Por exemplo,

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r}(t)\rangle &= \int d^3r\,\rho(\mathbf{r},t)\,\mathbf{r} = \int d^3r\,|\psi(\mathbf{r},t)|^2\,\mathbf{r} \qquad \text{ou}\\ \langle r^2(t)\rangle &= \int d^3r\,r^2\,|\psi(\mathbf{r},t)|^2. \end{aligned} \tag{5}$$

Já os valores médios do momento linear $\mathbf{p}(t)$ e $p^2(t)$ são obtidos de outra forma. Para tal, devemos notar que estados do tipo onda plana

$$\psi(\mathbf{r},t) = \psi_0\, e^{i\,(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-E\,t)/\hbar}$$

são tais que

$$-i\hbar\boldsymbol{\nabla}\psi(\mathbf{r},t) = \mathbf{p}\psi(\mathbf{r},t) \tag{6}$$

o que nos permite escrever para o pacote (3)

$$-i\hbar\boldsymbol{\nabla}\psi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int d^3p\,\mathbf{p}\,\tilde{\psi}(\mathbf{p})\,e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-E\,t)} \tag{7}$$

Multiplicando a equação acima por $\psi^*(\mathbf{r},t)$ à esquerda, teremos após integrar em d^3r

$$\int d^3r\,\psi^*(\mathbf{r},t)\,(-i\hbar\boldsymbol{\nabla})\,\psi(\mathbf{r},t) = \int \mathbf{p}\,|\tilde{\psi}(\mathbf{p})|^2 d^3p, \tag{8}$$

onde usamos que

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d^3r\,e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}} = \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}').$$

Como pela condição de normalização (4) $|\tilde{\psi}(\mathbf{p})|^2$ pode ser interpretado como a densidade de probabilidade de se encontrar a partícula com momento linear $\mathbf{p}$ (note que agora esta probabilidade está definida no espaço dos momentos lineares), podemos reescrever (8) como

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p}(t)\rangle &= \int \mathbf{p}|\tilde{\psi}(\mathbf{p},t)|^2 d^3p = \int d^3r\,\psi^*(\mathbf{r},t)\,(-i\hbar\boldsymbol{\nabla})\,\psi(\mathbf{r},t) \qquad \text{e}\\ \langle p^2(t)\rangle &= \int p^2|\tilde{\psi}(\mathbf{p},t)|^2 d^3p = \int d^3r\,\psi^*(\mathbf{r},t)\,(-\hbar^2\nabla^2)\,\psi(\mathbf{r},t) \end{aligned} \tag{9}$$

Assim, podemos escrever de forma geral:

$$\begin{aligned}\langle f(\mathbf{r})\rangle &= \int d^3r\,\psi^*(\mathbf{r},t)\;f(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r},t) \qquad \text{e}\\ \langle g(\mathbf{p})\rangle &= \int d^3r\,\psi^*(\mathbf{r},t)\;g(-i\hbar\boldsymbol{\nabla})\,\psi(\mathbf{r},t) \end{aligned} \tag{10}$$

onde

$$g(-i\hbar\boldsymbol{\nabla}) \equiv \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}g^{(n)}(0)\,(-i\hbar\boldsymbol{\nabla})^n.$$

Em função dos resultados aqui analisados podemos montar a estrutura matemática[4] desta teoria através dos seguintes pontos:

i) A normalização da função de onda assim como o princípio da superposição nos leva a considerá-la como um elemento de um espaço vetorial $\mathcal{F}$, dotado de produto interno e cujos elementos são funções de módulo quadrado integrável.

ii) A aplicação de operadores diferenciais do tipo $-i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ a ondas planas, resultando em um dado valor do momento linear, nos leva aos conceitos de operadores lineares, auto-funções e auto-valores (reais) destes operadores.

[4] Em linhas gerais. A sua estrutura formal será apresentada mais tarde.

iii) A decomposição de um pacote de onda em ondas planas nos leva ao conceito da decomposição espectral da função $\psi(\mathbf{r},t)$ em termos das auto-funções do operador momento linear com densidade de probabilidade $|\tilde{\psi}(\mathbf{p})|^2$.

iv) Os valores médios de operadores são formas bilineares da função $\psi(\mathbf{r},t)$ e do operador em questão, como em (10).

I.2) Polarização de fótons e a experiência de Stern-Gerlach

Para finalizar a análise do comportamento das ondas EM como composta por fótons, vamos estudar o experimento de polarização da luz. Suponha que incidimos sobre um polarizador uma onda EM polarizada na direção $\hat{\mathbf{e}}$ e que se propaga ao longo da direção $\hat{\mathbf{z}}$. O polarizador transmite a onda EM polarizada na direção $\hat{\mathbf{x}}$ e absorve a componente $\hat{\mathbf{y}}$. A onda polarizada na direção $\hat{\mathbf{e}}$ tem a forma

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = E_0\,\hat{\mathbf{e}}\,e^{i(k\,z-\omega\,t)}.$$

Após deixar o polarizador a onda eletromagnética é representada por

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r},t) = E_0'\,\hat{\mathbf{x}}\,e^{i\,(k\,z-\omega\,t)}$$

Como o ângulo entre $\hat{\mathbf{e}}$ e $\hat{\mathbf{x}}$ é θ e a intensidade $I \propto |\mathbf{E}|^2$ temos

$$E_0' = E_0\,\cos\theta \Rightarrow I' = I\,\cos^2\theta.$$

Vamos agora analisar este experimento do ponto de vista corpuscular. Quando um feixe pouco intenso atinge o polarizador, este deteta apenas a chegada individual de cada fóton: ou o fóton atravessa o polarizador ou é por ele absorvido. De antemão não podemos afirmar se um dado fóton será ou não absorvido. Só podemos ter conhecimento da probabilidade de um dado evento. Finalmente, após N fótons terem incidido sobre o polarizador apenas $N\cos^2\theta$ o terão atravessado. O que aqui ocorre pode ser resumido por:

i) Após o processo de interação com o polarizador, o fóton assume um ou outro valor de polarização através da sua absorção ou passagem pelo mesmo. Estes são os chamados *auto valores da medida*. Note que aqui o valor medido não varia continuamente como no caso clássico.

ii) Após a medida, os fótons terão, com certeza, polarização em $\hat{\mathbf{x}}$. Dizemos, então, que o seu estado de polarização é $\hat{\mathbf{x}}$. A cada auto valor corresponde um auto estado. No caso considerado, $\hat{\mathbf{x}}$ e $\hat{\mathbf{y}}$ são os *auto estados de polarização*.

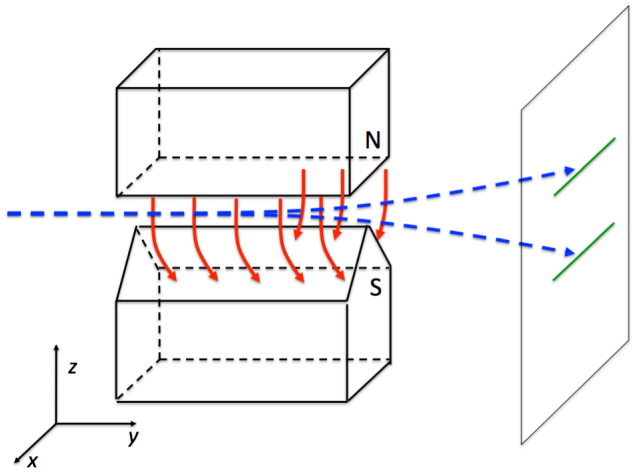
iii) Decomposição espectral: Podemos apenas saber a probabilidade de se obter um dado auto valor após a medida.

$$\Rightarrow\ \hat{\mathbf{e}} = \hat{\mathbf{x}}\,\cos\theta + \hat{\mathbf{y}}\,\sin\theta$$

onde

$$\left\{\begin{array}{l} P(\hat{\mathbf{x}}) = \cos^2\theta \\ P(\hat{\mathbf{y}}) = \sin^2\theta \end{array}\right\} \Rightarrow P(\hat{\mathbf{x}}) + P(\hat{\mathbf{y}}) = 1 \tag{11}$$

A propriedade de polarização dos fótons, ou melhor, do estado de polarização dos fótons não ocorre apenas para estes quanta da radiação EM. Partículas materiais também possuem estado de polarização e esta afirmativa é baseada na experiência de Stern-Gerlach que descrevemos abaixo, em sua versão simplificada.



Imaginemos um feixe de elétrons que atravessa o magneto representado na figura acima. A força que atua nos elétrons do feixe (colimado na direção $\hat{\mathbf{y}}$) é

$$\mathbf{F} = +\boldsymbol{\nabla}\left(\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B}\right)$$

onde $\boldsymbol{\mu}$ é o momento magnético do elétron e $\mathbf{B}$ o campo magnético. Devido à simetria na direção $\hat{\mathbf{y}}$ temos $B_y = 0$ e

$$\mathbf{B} = B_x(x,z)\,\hat{\mathbf{x}} + B_z(x,z)\,\hat{\mathbf{z}}$$

Por outro lado, se o feixe se propaga ao longo do eixo de simetria $\hat{\mathbf{y}}$, $B_x = 0$, $\boldsymbol{\nabla}B_x \approx 0$ e $\boldsymbol{\nabla}B_z \parallel \hat{\mathbf{z}}$,

$$\Rightarrow \mathbf{F} \approx \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}\Big|_{x=z=0}\hat{\mathbf{z}} = \mu\,\cos\theta\,\frac{\partial B_z}{\partial z}\Big|_{x=z=0}\hat{\mathbf{z}}$$

onde θ é o ângulo entre $\boldsymbol{\mu}$ e $\mathbf{B}$ (ou seja, $\hat{\mathbf{z}}$).

Se os elétrons têm momentos magnéticos distribuídos aleatoriamente esperaríamos uma distribuição uniforme de impactos na placa entre μ e $-\mu$ pois $\mu_z = \mu\,\cos\theta$. Entretanto, não é isto o que ocorre. A distribuição de impactos concentra-se nos valores extremos proporcionais a μ e $-\mu$.

Conhecendo-se $\partial B_z/\partial z$ e medindo a deflexão podemos encontrar o valor do momento magnético do elétron que é dado por

$$\mu = \frac{|e|\,\hbar}{2mc} \equiv \mu_B \text{ (magneton de Bohr)} \tag{12}$$

Neste ponto podemos comparar a fórmula de $\boldsymbol{\mu}$ com a de uma esfera de mesma carga e momento angular $\mathbf{L}$. A teoria clássica nos diz que ($e = -|e|$)

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2mc}\mathbf{L}\,\text{(cgs)} \tag{13}$$

e, portanto, seríamos tentados a associar um momento angular intrínseco $L = \hbar$ ao elétron. Entretanto, veremos mais tarde que esta associação está errada. O spin do elétron é tal que $S_z = \pm\hbar/2$ e portanto devemos generalizar a fórmula clássica para

$$\mu_z = g\left(\frac{e}{2mc}\right)S_z \tag{14}$$

onde g é o *fator giromagnético* do elétron (≈ 2).

O resultado da experiência nos leva a ampliar a nossa noção do estado eletrônico. Ao invés de descrevê-lo apenas como $\psi(\mathbf{r},t)$ precisamos levar em conta o seu momento magnético. As diferentes concentrações de impactos nos dão as probabilidades de encontrar o elétron com diferentes projeções do momento magnético. Desta forma,

$$\int d^3r\,\left(|\psi(\mathbf{r},\uparrow)|^2 + |\psi(\mathbf{r},\downarrow)|^2\right) = 1, \tag{15}$$

onde $\psi(\mathbf{r},\uparrow)$ ($\psi(\mathbf{r},\downarrow)$) representa a amplitude de probabilidade de encontrarmos o elétron com momento magnético na direção $\hat{\mathbf{z}}$ ($-\hat{\mathbf{z}}$). Este estado pode ser descrito como

$$\psi \;=\; \begin{bmatrix}\psi_\uparrow(\mathbf{r})\\ \psi_\downarrow(\mathbf{r})\end{bmatrix} = \psi_\uparrow(\mathbf{r})\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} + \psi_\downarrow(\mathbf{r})\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} \equiv \chi_\uparrow \;e\; \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} \equiv \chi_\downarrow \tag{16}$$

Note que $\chi_\uparrow$ e $\chi_\downarrow$ são análogos aos vetores unitários $\hat{\mathbf{x}}$ e $\hat{\mathbf{y}}$ na decomposição do campo elétrico

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = E_x(\mathbf{r})\hat{\mathbf{x}} + E_y(\mathbf{r})\hat{\mathbf{y}}$$

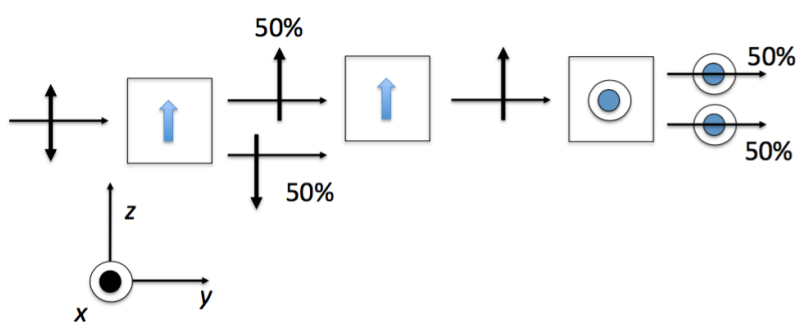
numa experiência de polarização do campo EM. Entretanto esta analogia não é completa. Enquanto $\hat{\mathbf{x}}$ e $\hat{\mathbf{y}}$ representam os estados de polarização dos fótons nas direções $\hat{\mathbf{x}}$ e $\hat{\mathbf{y}}$, $\chi_\uparrow$ e $\chi_\downarrow$ estão associados ao momento magnético apontar ao longo de $\hat{\mathbf{z}}$ e $-\hat{\mathbf{z}}$. $\chi_\uparrow$ e $\chi_\downarrow$, apesar de admitirem a representação bidimensional, não representam os unitários do sistema cartesiano bidimensional. A nossa conclusão é que os pontos (i), (ii) e (iii) que enfatizamos no caso da experiência com fótons ocorrem também no caso de partículas massivas que possuem $\boldsymbol{\mu} \neq 0$. Um fóton passando pelo polarizador $\leftrightarrow$ elétron defletido para $\chi_\uparrow$ enquanto que o fóton absorvido $\leftrightarrow$ elétron defletido para $\chi_\downarrow$. A probabilidade de se encontrar $+\mu_B$ $(-\mu_B)$ é $|\psi_\uparrow|^2$ $(|\psi_\downarrow|^2)$ e temos $|\psi_\uparrow|^2 + |\psi_\downarrow|^2 = 1$.[5]

Então: medida $\leftrightarrow$ $A\psi_n = \lambda_n \psi_n$ e $\psi = \sum_n a_n \psi_n$ com $\sum_n |a_n|^2 = 1$, onde $|a_n|^2$ é a probabilidade de se medir λ_n.

Quando coletamos o feixe defletido, por exemplo, para cima e repetimos a mesma experiência com $\boldsymbol{\nabla} B_z \parallel \hat{\mathbf{z}}$ só existe um feixe defletido e este corresponde a termos $\boldsymbol{\mu} = +\mu_B \hat{\mathbf{z}}$. Ou seja, após a medida o estado é, com certeza, $\bar{\psi}(\mathbf{r}) = \bar{\psi}_\uparrow(\mathbf{r})\chi_\uparrow$ onde $\int |\bar{\psi}_\uparrow(\mathbf{r})|^2 d^3r = 1$.

Usando ainda este mesmo feixe e fazendo com que ele passe através de um outro aparato de Stern-Gerlach que desta vez tem $\boldsymbol{\nabla} B_x \parallel \hat{\mathbf{x}}$, ou seja, que foi girado de $\pi/2$ em torno de $\hat{\mathbf{y}}$ encontramos, novamente, dois picos em $\pm\mu_B$ com as mesmas intensidades. As intensidades dos picos dependem do ângulo de que o imã é girado em torno de $\hat{\mathbf{y}}$.

Esquematicamente,



Isto é equivalente a dizermos que incidindo sobre o imã de $\boldsymbol{\nabla} B_z \parallel \hat{z}$ um feixe com elétrons polarizados na direção $\hat{n} = (\sin\theta, 0, \cos\theta)$ o separaremos em dois outros feixes polarizados em $\pm\hat{z}$ com intensidades relativas dependentes de θ [6]: $P_\uparrow = \cos^2\frac{\theta}{2}$ e $P_\downarrow = \sin^2\frac{\theta}{2}$.

O que vimos até o momento já nos permite descrever a estrutura matemática da mecânica quântica, assim como os seus postulados. Mais tarde retornaremos ao problema de Stern-Gerlach munidos de um formalismo mais poderoso.

[5] $|\psi_i|^2 \equiv \int d^3r |\psi(\mathbf{r}, i)|^2, \quad i = \uparrow$ ou $\downarrow$.

[6] A ser demonstrado mais adiante.