I.3) Formalismo

O espaço das funções:

i) Normalização de $\psi(\mathbf{r},t) \Rightarrow$ espaço vetorial dotado de produto interno $\Rightarrow$ espaço de Hilbert.

ii) Princípio da decomposição espectral $\Rightarrow$ base ortonormal e auto valores.

iii) Identificações: $\mathbf{p} \to -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ e $\mathbf{r} \to \mathbf{r} \Rightarrow$ operadores.

Seja $\mathcal{F}$ o espaço das funções suficientemente regulares de quadrado integrável. $\mathcal{F}$ é um espaço vetorial.

A cada par $\varphi(\mathbf{r})$ e $\psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{F}$ define-se o produto interno

$$(\varphi,\psi) = \int d^3r\, \varphi^*(\mathbf{r})\, \psi(\mathbf{r})$$

Propriedades do produto interno:

i) $(\varphi,\psi) = (\psi,\varphi)^*$

ii) $(\varphi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\varphi,\psi_1) + \lambda_2(\varphi,\psi_2)$

iii) $(\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2, \psi) = \lambda_1^*(\varphi_1,\psi) + \lambda_2^*(\varphi_2,\psi)$

iv) $(\varphi,\psi) = 0 \Rightarrow \varphi \perp \psi$
$(\varphi,\varphi) \equiv ||\varphi||^2$ e $(\varphi,\varphi) = 0 \Leftrightarrow \varphi = 0$

Desigualdade de Schwarz: $|(\varphi,\psi)| \leq ||\varphi||\,||\psi||$

Os objetos matemáticos que levam $\mathcal{F} \to \mathcal{F}$ são os *operadores*: $\psi'(\mathbf{r}) = A\,\psi(\mathbf{r})$.

Se $A\,(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1 A\psi_1 + \lambda_2 A\psi_2$, o operador é dito *linear*.

Exemplos:

i) Seja $D_x = \partial/\partial x$. Então $D_x\psi(\mathbf{r}) = \partial\psi/\partial x$.

$$D_x(\lambda_1\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2\psi_2(\mathbf{r})) = \lambda_1\frac{\partial\psi_1}{\partial x} + \lambda_2\frac{\partial\psi_2}{\partial x} = \lambda_1 D_x\psi_1 + \lambda_2 D_x\psi_2 \Longrightarrow \text{operador linear}$$

ii) Seja $\psi'(\mathbf{r}) = \int A(\mathbf{r},\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')d^3r' \equiv A\psi$.

$$\text{Se} \quad \psi(\mathbf{r}) = \lambda_1\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2\psi_2(\mathbf{r}),\ \text{teremos } A\psi = \lambda_1 A\psi_1 + \lambda_2 A\psi_2 \Longrightarrow \text{ operador linear.}$$

O produto de A por B é tal que

$$(AB)\varphi(\mathbf{r}) = A(B\varphi(\mathbf{r}))$$

Em geral $AB \neq BA$ e $AB - BA \equiv [A,B]$

Exemplo:

$$[x,p_x]\psi = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}x\psi = i\hbar\psi \Rightarrow [x,p_x] = i\hbar$$

Base: Um conjunto discreto $\{u_i(\mathbf{r})\} \in \mathcal{F}$ é uma base quando

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i u_i(\mathbf{r})$$

e os estados $u_i(\mathbf{r})$ são linearmente independentes.

A base é *ortonormal* se $(u_i, u_j) = \int d^3r\, u_i^*(\mathbf{r}) u_j(\mathbf{r}) = \delta_{ij}$

Assim, se

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i u_i(\mathbf{r})$$

temos $c_i = (u_i, \psi)$. Se

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_i b_i u_i(\mathbf{r})$$

temos

$$(\psi, \varphi) = \sum_i c_i^* b_i.$$

Com o resultado acima pode-se mostrar que

$$\sum_i u_i^*(\mathbf{r}') u_i(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \text{ (Completeza)}$$

Existem ainda conjuntos $\notin \mathcal{F}$ que podem ser usados como base de $\mathcal{F}$. Exemplo:

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

onde

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

Tomemos como base o conjunto contínuo $v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\,\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$.

Assim, $\overline{\psi}(\mathbf{p})$ é a componente de $\psi(\mathbf{r})$ na "direção" $v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$

$$\begin{aligned}
\psi(\mathbf{r}) &= \int d^3p\, v_p(\mathbf{r}) \overline{\psi}(\mathbf{p}) \quad (\psi = \sum_i c_i u_i) \\
\overline{\psi}(\mathbf{p}) &= \int d^3r\, v_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r})\, \psi(\mathbf{r}) = (v_{\mathbf{p}}, \psi) \quad (c_i = (u_i, \psi)) \\
\sum_i &\leftrightarrow \int d^3p
\end{aligned}$$

Ortogonalidade:

$$(v_{\mathbf{p}}, v_{\mathbf{p}'}) = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \Rightarrow \delta_{ij} \leftrightarrow \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$$

Completeza:

$$\int d^3p\, v_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r})\, v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

Em geral:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d\alpha\, c(\alpha)\, \omega_\alpha(\mathbf{r}) \quad \text{onde} \quad c(\alpha) = (\omega_\alpha, \psi)$$

No caso de

$$(\omega_\alpha, \omega_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$$

a relação de completeza se escreve

$$\begin{aligned} \int d\alpha\, \omega_\alpha^*(\mathbf{r})\, \omega_\alpha(\mathbf{r}') &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ \sum_i &\leftrightarrow \int d\alpha \end{aligned}$$

A mesma função $\psi(\mathbf{r})$ pode ter diferentes componentes:

$$\begin{aligned} c_i &\leftrightarrow \{u_i(\mathbf{r})\} \\ \overline{\psi}(\mathbf{p}) &\leftrightarrow \{v_\mathbf{p}(\mathbf{r})\} \\ \psi(\mathbf{r_0}) &\leftrightarrow \{\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r_0})\} \end{aligned}$$

Espaço de Estados

$|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ possui inúmeras representações. Um *funcional* F é tal que $F\left[|\psi\rangle\right] \in \mathbb{C}$. Se

$$F\left[\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle\right] = \lambda_1 F\left[|\psi_1\rangle\right] + \lambda_2 F\left[|\psi_2\rangle\right] \Rightarrow \text{funcional linear.}$$

Se

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i u_i(\mathbf{r}) \Rightarrow F[\psi] = \sum_i c_i F[u_i(\mathbf{r})]$$

Mas

$$\begin{aligned} c_i = (u_i, \psi) \Rightarrow F[\psi] &= \sum_i (u_i, \psi)\, F[u_i(\mathbf{r})] \\ \Rightarrow F[\psi] = \sum_i (F^*[u_i]\, u_i, \psi) &= (\psi_F, \psi) \quad \text{onde} \\ \psi_F &\equiv \sum_i F^*[u_i]\, u_i(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{1}$$

$\Rightarrow$ a cada funcional F corresponde uma função $\psi_F(\mathbf{r})$, construida acima, tal que $F[\psi] = (\psi_F, \psi)$.

O espaço de todos os F's é também um espaço vetorial $\mathcal{F}^*$ chamado o *dual* de $\mathcal{F}$. Assim podemos definir $\mathcal{E}^*$ como o dual de $\mathcal{E}$. Se

$$|\psi\rangle \in \mathcal{E} \text{ e } \langle\varphi| \in \mathcal{E}^* \Rightarrow (\varphi, \psi) = \sum_i a_i^* b_i = \langle\varphi|\psi\rangle\,.$$

Propriedades:

$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi, \varphi\rangle^*$

$\langle\varphi|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1 \langle\varphi|\psi_1\rangle + \lambda_2 \langle\varphi|\psi_2\rangle$

$\langle\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2|\psi\rangle = \lambda_1^* \langle\varphi_1|\psi\rangle + \lambda_2^* \langle\varphi_2|\psi\rangle$

$\langle\psi|\psi\rangle = ||\psi||^2 \in \mathbb{R}$ e $||\psi|| \geq 0 \quad (= 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle = 0)$

Nota:

$$|v_{\mathbf{p}}\rangle \leftrightarrow v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \notin \mathcal{F} \Rightarrow |v_{\mathbf{p}}\rangle \notin \mathcal{E}$$

mas

$$F_v[\psi] = \int d^3r\, v_p^*(\mathbf{r})\, \psi(\mathbf{r}) = \overline{\psi}(\mathbf{p}) = \langle v_p|\psi\rangle \text{ existe } \Rightarrow |v_{\mathbf{p}}\rangle \notin \mathcal{E} \quad \text{mas} \quad \langle v_{\mathbf{p}}| \in \mathcal{E}^*$$

Operadores lineares:

$$\begin{aligned} |\psi'\rangle &= A\,|\psi\rangle \\ A\,|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle &= \lambda_1 A\,|\psi_1\rangle + \lambda_2 A\,|\psi_2\rangle \end{aligned}$$

A combinação $|\varphi\rangle\langle\psi|$ é um operador linear.

Em particular, $|\psi\rangle\langle\psi| \equiv \mathbb{P}_\psi$ é o projetor no subespaço gerado por $|\psi\rangle$ (se $\langle\psi|\psi\rangle = 1$).

$$\mathbb{P}\,|\phi\rangle = |\psi\rangle \underbrace{\langle\psi|\phi\rangle}_{\text{componente de } |\phi\rangle \text{ ao longo de } |\psi\rangle}$$

Seja $\{|\psi_i\rangle\}$ tal que $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$. Então, $\mathbb{P}_N \equiv \sum_{i=1}^{N} |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ é tal que

$$\mathbb{P}_N|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} \underbrace{\langle\psi_i|\psi\rangle}_{c_i}|\psi_i\rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i|\psi_i\rangle$$

que é o projetor no subespaço $\mathcal{E}_N \subseteq \mathcal{E}$.

$$\mathbb{P}_N^2 = \sum_{ij} |\psi\rangle\underbrace{\langle\psi_i|\psi_j\rangle}_{\delta_{ij}}\langle\psi| = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \mathbb{P}_N$$

Operadores Adjuntos:

Consideremos a forma bilinear $\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\varphi|(A|\psi\rangle)$ ou $\langle\varphi|A\psi\rangle$.

Por outro lado, $\langle\varphi|A$ define um "bra" tal que $(\langle\varphi|A)|\psi\rangle \in \mathbb{C}$.

Seja $|\psi'\rangle \equiv A|\psi\rangle$. Vamos definir $\langle\psi'| \equiv \langle\psi|A^\dagger$; $\quad A^\dagger -$ *operador adjunto* de A

$$\Rightarrow \langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle = \langle\psi'|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi'\rangle^* = \langle\varphi|A|\psi\rangle^*$$

Propriedades:

$(A^\dagger)^\dagger = A$

$(\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger$

$(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$

$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$

O operador é dito *hermitiano* quando $A^\dagger = A$

O operador é dito *unitário* quando $U^\dagger = U^{-1}$

O operador é dito *normal* quando $A^\dagger A = AA^\dagger$

Representações:

Como já antecipamos:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_i c_i |u_i\rangle \\ \langle u_i|u_j\rangle &= \delta_{ij} \\ \sum_i |u_i\rangle\langle u_j| &= \mathbb{1} \end{aligned}$$

ou, na versão contínua,

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \int d\alpha\, c(\alpha)\, |u_\alpha\rangle \\ \langle u_\alpha|u_{\alpha'}\rangle &= \delta(\alpha-\alpha') \\ \int d\alpha\, |u_\alpha\rangle\langle u_\alpha| &= \mathbb{1} \end{aligned}$$

Simplificando a notação, $|u_\alpha\rangle \leftrightarrow |\alpha\rangle$, temos:

Bras:

$$\langle\psi| = \langle\psi|\mathbb{1} = \begin{cases} \sum_i \langle\psi|u_i\rangle\langle u_i| = \sum_i c_i^* \langle u_i| \\ \int d\alpha\, \langle\psi|\alpha\rangle\langle\alpha| = \int d\alpha\, c^*(\alpha)\langle\alpha| \end{cases}$$

Kets:

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \begin{cases} \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \\ \int d\alpha\, |\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle = \int d\alpha\, c(\alpha)\, |\alpha\rangle \end{cases}$$

Produto escalar:

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\mathbb{1}|\psi\rangle = \begin{cases} \sum_i \langle\varphi|u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle = \sum_i b_i^* c_i \\ \int d\alpha\, \langle\varphi|\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle = \int d\alpha\, b^*(\alpha)\, c(\alpha) \end{cases}$$

Operadores:

$$A = \mathbb{1}A\mathbb{1} = \begin{cases} \sum_{ij} |u_i\rangle\langle u_i| \, A \, |u_j\rangle\langle u_j| = \sum_{ij} A_{ij} |u_i\rangle\langle u_j| \\ \\ \iint d\alpha d\alpha' \, A\,(\alpha, \alpha')\, |\alpha\rangle\langle\alpha'| \end{cases}$$

Onde $A_{ij} \equiv \langle u_i| \, A \, |u_j\rangle$ e $A(\alpha, \alpha') \equiv \langle\alpha| \, A \, |\alpha'\rangle$.

Podemos ainda mostrar que:

$$\begin{aligned} (AB)_{\alpha\alpha'} &= \int A(\alpha, \beta)\, B(\beta, \alpha') d\beta \\ \langle\alpha| \, A \, |\psi\rangle &= \int A(\alpha, \alpha') c(\alpha') d\alpha' \\ \langle\varphi| \, A \, |\psi\rangle &= \int b^*(\alpha) A(\alpha, \alpha')\, c(\alpha')\, d\alpha' d\alpha \\ (A^\dagger)_{ij} &= A^*_{ji} \text{ e} \\ A^\dagger(\alpha, \beta) &= A^*(\beta, \alpha) \end{aligned}$$

Mudança de representação:

Consideremos duas bases $\{|u_i\rangle\}$ e $\{|v_i\rangle\}$.

Conhecemos as componentes de estados e operadores em $\{|u_i\rangle\}$ e queremos relacioná-las com as componentes em $\{|v_i\rangle\}$.

Kets:

$$\langle u_i|\psi\rangle = c_i \quad ; \quad \langle v_i|\psi\rangle = c'_i = ?$$

$$\langle v_i|\psi\rangle = \langle v_i|\mathbb{1}|\psi\rangle = \sum_j \langle v_i|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle$$

$$\text{Se } S_{ij} \equiv \langle u_i|v_j\rangle \Rightarrow S^*_{ij} = \langle v_j|u_i\rangle = S^\dagger_{ji}$$

$$\Rightarrow c'_i = \sum_j S^\dagger_{ij} c_j \quad \text{onde} \quad S^\dagger_{ij} = \langle v_i|u_j\rangle$$

$$\text{Pode-se mostrar que } S^\dagger = S^{-1} \text{ (unitário)}$$

Bras:

$$\langle\psi|v_i\rangle = \sum_j \langle\psi|u_j\rangle\langle u_j|v_i\rangle = \sum_j S_{ji} c^*_j \Rightarrow c'^*_i = \sum_j S_{ji} c^*_j$$

Operadores:

$$\begin{aligned} \langle v_i|A|v_j\rangle &= \sum_{kl} \langle v_i|u_k\rangle\langle u_k|A|u_l\rangle\langle u_l|v_j\rangle \\ &= \sum_{kl} S^\dagger_{ik} A_{kl} S_{lj} \\ \Rightarrow A'_{ij} &= \sum_{kl} S^\dagger_{ik} A_{kl} S_{lj} \end{aligned}$$

Notação matricial:

$$c' = S^\dagger c \quad c'^\dagger = c^\dagger S \qquad \text{e} \quad A' = S^\dagger A\, S$$

Problemas de auto valores e observáveis

Os estados $|\psi\rangle$ que são soluções de $A\,|\psi\rangle = \lambda\,|\psi\rangle$ são os *autoestados* de A e os valores de λ associados a cada $|\psi\rangle$ são os *autovalores* de A.

Se há vários auto estados para um mesmo autovalor λ, este é dito degenerado e o grau de degenerescência, g , de λ é o número de auto estados a ele associados.

Se

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{g} c_n\,|\psi_n\rangle$$

e

$$A\,|\psi_n\rangle = \lambda\,|\psi_n\rangle \qquad n = 1\ldots g \quad \Rightarrow A\,|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{g} c_n\,A\,|\psi_n\rangle = \lambda\,|\psi\rangle$$

Vamos escrever $A\,|\psi\rangle = \lambda\,|\psi\rangle$ na base $\{|u_i\rangle\}$:

$$\sum_j \langle u_i|\,A\,|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle = \lambda\langle u_i|\psi\rangle.$$

$$\text{Seja } |\psi\rangle = \sum_n c_n|u_n\rangle \Rightarrow \sum_j A_{ij}c_j = \lambda c_i$$

$$\Rightarrow \sum_j (A_{ij} - \delta_{ij}\lambda)c_j = 0$$

$$\Rightarrow \text{Sistema linear homogêneo nas variáveis } c_j$$

Solução não trivial: $\det(A - \lambda\mathbb{1}) = 0$

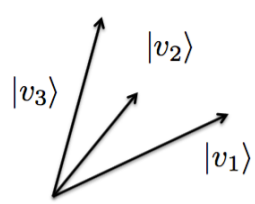
Calculamos os autovalores λ e os autoestados serão as soluções do sistema para cada λ encontrado.

Se λ é uma raiz simples $\Rightarrow$ $N-1$ equações independentes e $|\psi_n\rangle$ é determinado a menos de uma constante.

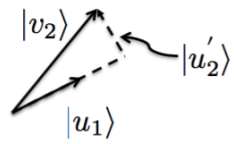
Se λ é uma raiz de multiplicidade q e $\exists$ $N-q$ equações independentes, elas determinam o subespaço de dim $= q$. Em caso contrário o problema não é diagonalizável.

Se a base do subespaço de dim $= q$ não for ortogonal podemos ortogonalizá-la.

Ortogonalização de Gram-Schmidt:



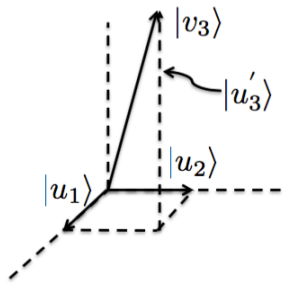
$$|u_1\rangle \equiv \frac{|v_1\rangle}{\sqrt{\langle v_1|v_1\rangle}} = \frac{|v_1\rangle}{||v_1||}$$



$$|u_2'\rangle \equiv |v_2\rangle - |u_1\rangle\langle u_1|v_2\rangle$$

$$\text{como } \langle u_2'|u_2'\rangle = ||v_2||^2 - |\langle u_1|v_2\rangle|^2$$

$$|u_2\rangle \equiv \frac{|v_2\rangle - \langle u_1|v_2\rangle\,|u_1\rangle}{\sqrt{||v_2||^2 - |\langle u_1|v_2\rangle|^2}}$$



$$|u_3'\rangle = |v_3\rangle - \langle u_1|v_3\rangle|u_1\rangle - \langle u_2|v_3\rangle|u_2\rangle$$

$$\text{como } \langle u_3'|u_3'\rangle = ||v_3||^2 - |\langle u_1|v_3\rangle|^2 - |\langle u_2|v_3\rangle|^2$$

$$|u_3\rangle \equiv \frac{|v_3\rangle - \langle u_1|v_3\rangle|u_1\rangle - \langle u_2|v_3\rangle|u_2\rangle}{\sqrt{||v_3||^2 - |\langle u_1|v_3\rangle|^2 - |\langle u_2|v_3\rangle|^2}}$$

Observáveis:

Quando $A^\dagger = A$ (operador hermitiano)

i) Os seus autovalores são reais.

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \lambda\langle\psi|\psi\rangle \text{ mas } \langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|A^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle^*$$

$$\Rightarrow \langle\psi|A|\psi\rangle \in \mathbb{R}$$

$$\text{como } \langle\psi|\psi\rangle = ||\psi||^2 \in \mathbb{R} \Rightarrow \lambda \in \mathbb{R}$$

ii) Os seus autoestados correspondentes a diferentes λ's são perpendiculares.

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \Rightarrow \langle\varphi|A|\psi\rangle = \lambda\langle\varphi|\psi\rangle$$

$$A|\varphi\rangle = \mu|\varphi\rangle \Rightarrow \langle\psi|A|\varphi\rangle = \mu\langle\psi|\varphi\rangle$$

$$\text{mas } \langle\psi|A|\varphi\rangle = \langle\varphi|A^\dagger|\psi\rangle^* = \langle\varphi|A|\psi\rangle^*$$

$$\Rightarrow (\langle\varphi|A|\psi\rangle^*)^* = \mu^*\langle\varphi|\psi\rangle = \mu\langle\varphi|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \langle\varphi|A|\psi\rangle = \lambda\langle\varphi|\psi\rangle \qquad \text{e} \qquad \langle\varphi|A|\psi\rangle = \mu\langle\varphi|\psi\rangle \\ \Rightarrow (\lambda - \mu)\langle\varphi|\psi\rangle = 0 \end{cases}$$

$$\text{como } \lambda \neq \mu \Rightarrow |\varphi\rangle \perp |\psi\rangle.$$

iii) A é um observável quando

$$A^\dagger = A \qquad \text{e} \qquad \mathbb{1} = \sum_n \sum_i^{g_n} |u_n^{(i)}\rangle\langle u_n^{(i)}|$$

$$\text{onde} \quad A|u_n^{(i)}\rangle = \lambda_n |u_n^{(i)}\rangle \quad i = 1, ..., g_n$$

$$\text{e} \quad \langle u_n^{(i)}|u_m^{(j)}\rangle = \delta_{mn}\delta_{ij}$$

$$g_n \text{ é a degenerescência de } \lambda_n.$$

Teoremas sobre observáveis:

i) Se $[A, B] = 0$ e $A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \Rightarrow B|\psi\rangle$ é autoestado de A com autovalor λ

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \Rightarrow BA|\psi\rangle = \lambda B|\psi\rangle \text{mas } AB = BA$$

$$\Rightarrow AB|\psi\rangle = \lambda B|\psi\rangle$$

$$\text{se} \begin{cases} \text{subespaço tem dim=1} \quad B|\psi\rangle \propto |\psi\rangle \\ \text{subespaço tem dim>1} \quad B|\psi_\lambda\rangle = \sum_i^g c_i |\psi_\lambda^{(i)}\rangle \end{cases}$$

ii) Se $[A, B] = 0$, $A|\psi_1\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle$, $A|\psi_2\rangle = \lambda_2|\psi_2\rangle$ e $\lambda_1 \neq \lambda_2 \Rightarrow \langle\psi_1|B|\psi_2\rangle = 0$.

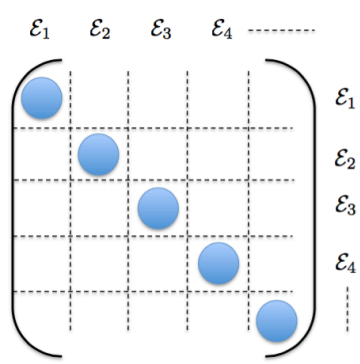
$$0 = \langle\psi_1|[A, B]|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|AB|\psi_2\rangle - \langle\psi_1|BA|\psi_2\rangle$$

$$= \lambda_1\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle - \lambda_2\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle = (\lambda_1 - \lambda_2)\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle$$

$$\text{como } \lambda_1 \neq \lambda_2; \ \langle\psi_1|B|\psi_2\rangle = 0$$

iii) Se $[A, B] = 0$ pode-se construir uma base ortonormal de auto estados comuns a A e B. Seja

$\langle u_n^{(i)}|B|u_m^{(j)}\rangle =$



1º caso) $g_n = 1 \Rightarrow \langle u_n|B|u_m\rangle$ é diagonal

2º caso) $g_n \neq 1 \Rightarrow$ diagonalizar os blocos $g_n \times g_n$ porque $B = B^\dagger$.

$$\Rightarrow |u_{np}^{(i)}\rangle \quad i = 1, ..., g_p$$

$$\text{é tal que} \begin{cases} A|u_{np}^{(i)}\rangle = a_n|u_{np}^{(i)}\rangle \\ \\ B|u_{np}^{(i)}\rangle = b_p|u_{np}^{(i)}\rangle \end{cases}$$

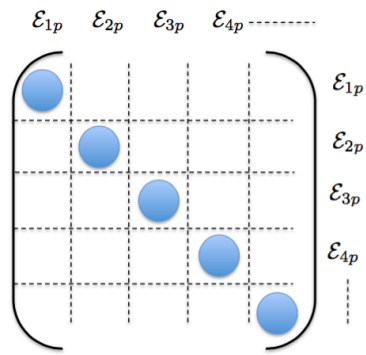
Conjunto completo de observáveis que comutam (CCOC):

Seja um 3º operador C tal que

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

Os elementos de C em $|u_{np}^{(i)}\rangle$ são

$$\langle u_{np}^{(i)}|C|u_{ml}^{(j)}\rangle =$$



que também pode ser diagonalizada pois $C^\dagger = C$.

Um CCOC é o conjunto de operadores $A, B, C, ...$ que comutam aos pares e que determinam

$$\begin{aligned} |u_{npqrs...}\rangle &= |a_n, b_p, c_q, d_r ...\rangle \\ A|a_n b_p ...\rangle &= a_n|a_n b_p ...\rangle \\ B|a_m b_p ...\rangle &= b_p|a_m b_p ...\rangle \qquad \text{etc, etc...} \end{aligned}$$

Representações e observáveis:

$$
\begin{aligned}
v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \exp \frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar} \leftrightarrow |\mathbf{p}\rangle \\
\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) &= \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) \leftrightarrow |\mathbf{r}_0\rangle \\
&\Downarrow \\
|\psi\rangle &= \int \psi(\mathbf{r}_0)\,|\mathbf{r}_0\rangle d^3r_0 \\
|\psi\rangle &= \int \overline{\psi}(\mathbf{p})\,|\mathbf{p}\rangle d^3p \\
\langle\mathbf{r}_0|\mathbf{r}_0'\rangle &= \delta(\mathbf{r}_0-\mathbf{r}_0') \text{ e } \int |\mathbf{r}_0\rangle\langle\mathbf{r}_0|\; d^3r_0 = \mathbb{1} \\
\langle\mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle &= \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \text{ e } \int |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}|\; d^3p = \mathbb{1}
\end{aligned}
$$

Como

$$
\begin{aligned}
\langle\mathbf{r}_0|\psi\rangle &= \int d^3r\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\,\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}_0) \\
\langle\mathbf{p}|\psi\rangle &= \int d^3r\,\frac{e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\psi(\mathbf{r}) = \overline{\psi}(\mathbf{p})
\end{aligned}
$$

Temos

$$
\begin{aligned}
\langle\mathbf{p}|\psi\rangle &= \int d^3r'\,\langle\mathbf{p}|\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|\psi\rangle = \overline{\psi}(\mathbf{p}) \\
&\Downarrow \\
\langle\mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle &= \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}
\end{aligned}
$$

Os operadores $\mathbf{R}$ e $\mathbf{P}$:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{R} &= \iint d^3r'\,d^3r''\,|\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|\mathbf{R}|\mathbf{r}''\rangle\langle\mathbf{r}''| \\
\mathbf{R}|\psi\rangle &= \iint d^3r'\,d^3r''\,|\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|\mathbf{R}|\mathbf{r}''\rangle\psi(\mathbf{r}'') \\
\langle\mathbf{r}|\mathbf{R}|\psi\rangle &= \iint d^3r'\,d^3r''\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\langle\mathbf{r}'|\mathbf{R}|\mathbf{r}''\rangle\psi(\mathbf{r}'') \\
&= \int \langle\mathbf{r}|\mathbf{R}|\mathbf{r}''\rangle\psi(\mathbf{r}'')\,d^3r''
\end{aligned}
$$

Mas

$$
\begin{aligned}
\langle\mathbf{r}|\mathbf{R}|\psi\rangle &= \mathbf{r}\psi(\mathbf{r}) \;\Rightarrow \\
\langle\mathbf{r}|\mathbf{R}|\mathbf{r}''\rangle &= \mathbf{r}''\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'') \text{ ou } \mathbf{R}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle
\end{aligned}
$$

Assim

$$
\begin{aligned}
\langle \mathbf{r}|\mathbf{P}|\psi\rangle &= \int d^3p\, \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle\, \mathbf{p}\, \overline{\psi}(\mathbf{p}) \\
&= \int d^3p \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}}\, \mathbf{p}\, \overline{\psi}(\mathbf{p}) \\
&= -i\hbar\boldsymbol{\nabla} \int d^3p \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}}\, \overline{\psi}(\mathbf{p}) \\
&= -i\hbar\boldsymbol{\nabla}\psi(\mathbf{r})
\end{aligned}
$$

Mais sobre operadores:

i) Funções de operadores

a) Dado A, A^n é tal que $A^n|\psi\rangle \equiv \underbrace{A....A}_{n\ vezes}|\psi\rangle$

b) A^{-1} é tal que $AA^{-1} = A^{-1}A = \mathbb{1}$.

c) Seja $f(z) = \sum_n f_n z^n$. Então $F(A) = \sum_n f_n A^n$.

d) Se $A = A^\dagger \Rightarrow F(A) = F(A^\dagger) = [F(A)]^\dagger$

e) Se $A|\psi_q\rangle = \lambda_q|\psi_q\rangle \Rightarrow A^n|\psi_q\rangle = \lambda_q^n|\psi_q\rangle \Rightarrow F(A)|\psi_q\rangle = F(\lambda_q)|\psi_q\rangle$

f) Assim, $F(A) = \sum_{ij} |i\rangle\langle i|\, F(A)\, |j\rangle\langle j| = \sum_{ij} F(\lambda_i)\, |i\rangle\langle i|$

g) Sabemos que $|i\rangle\langle i| = \mathbb{P}_i$ que também pode ser representado por:

$$
\mathbb{P}_i = \prod_{j\neq i} \frac{\lambda_j - A}{\lambda_j - \lambda_i}
$$

pois

$$
\begin{aligned}
\mathbb{P}_i|i\rangle &= \prod_{j\neq i} \frac{\lambda_j - A}{\lambda_j - \lambda_i}|i\rangle = \prod_{j\neq i} \frac{\lambda_j - \lambda_i}{\lambda_j - \lambda_i}|i\rangle = |i\rangle \\
\mathbb{P}_i|k\rangle &= \prod_{j\neq i} \frac{\lambda_j - A}{\lambda_j - \lambda_i}|k\rangle = \prod_{j\neq i} \frac{\lambda_j - \lambda_k}{\lambda_j - \lambda_i}|k\rangle = 0 \\
\Rightarrow F(A) &= \sum_i F(\lambda_i) \prod_{j\neq i} \frac{\lambda_j - A}{\lambda_j - \lambda_i}
\end{aligned}
$$

ii) Operadores unitários

U é unitário quando

$$
U^{-1} = U^\dagger \Rightarrow UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{1}
$$

Quando $|\widetilde{\psi_1}\rangle = U\,|\psi_1\rangle$ e $|\widetilde{\psi_2}\rangle = U\,|\psi_2\rangle$ temos

$$
\begin{aligned}
\langle\widetilde{\psi_1}|\widetilde{\psi_2}\rangle &= \langle\psi_1|U^\dagger U|\psi_2\rangle \\
&= \langle\psi_1|\psi_2\rangle \Rightarrow \text{produto interno é preservado pela transformação unitária.}
\end{aligned}
$$

Em geral podemos escrever

$$
\begin{aligned}
U &= e^{iA} \quad \text{porque} \quad U^\dagger = e^{-iA^\dagger} \quad \text{e se} \quad A = A^\dagger, \\
U^\dagger &= e^{-iA} \quad \Rightarrow \quad UU^\dagger = e^{iA}e^{-iA} = \mathbb{1}
\end{aligned}
$$

onde usamos a propriedade $e^A e^B = e^{A+B} e^{[A,B]/2}$ se $[A,[A,B]] = [B,[A,B]] = 0$. Assim

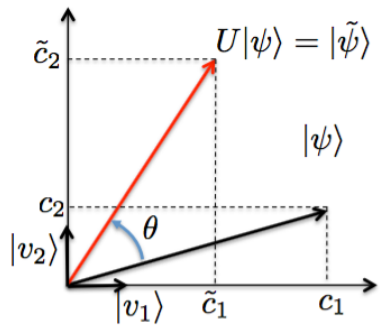
$$U = e^{iA} \quad \text{onde} \quad A^\dagger = A$$

Se $U^{-1} = U^\dagger$ e $V^{-1} = V^\dagger \Rightarrow$

$$\begin{aligned}
(UV)^\dagger &= (UV)^{-1} \\
&= V^\dagger U^\dagger \\
(UV)^\dagger UV &= V^\dagger \underbrace{U^\dagger U}_{\mathbb{1}} V \\
&= V^\dagger V \\
&= \mathbb{1} \\
\Rightarrow (UV)^\dagger &= (UV)^{-1}
\end{aligned}$$

Transformação de estados:

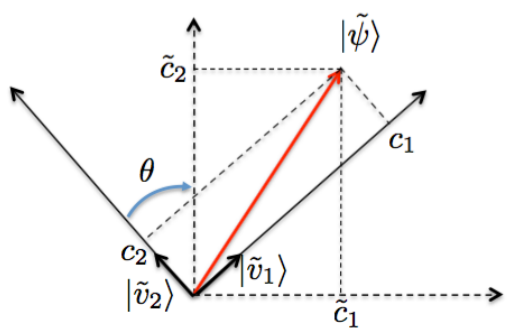
$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |v_i\rangle \Rightarrow U|\psi\rangle = |\widetilde{\psi}\rangle = \sum_j \widetilde{c}_j |v_j\rangle$$



Mas

$$\begin{aligned}
|\widetilde{\psi}\rangle &= \sum_j c_j U|v_j\rangle = \sum_j c_j |\widetilde{v}_j\rangle \\
\Rightarrow \langle v_i|\widetilde{\psi}\rangle \equiv \widetilde{c}_i &= \sum_j \langle v_i|\widetilde{v}_j\rangle c_j \\
\langle v_i|\widetilde{v}_j\rangle &= \langle v_i|U|v_j\rangle = U_{ij},
\end{aligned}$$

que pode ser vista como matriz de mudança de base $S^\dagger_{ij}$ onde $\{|v_i\rangle\}$ é a "nova base" e $\{|\widetilde{v}_i\rangle\}$ a "velha base"



$$\Downarrow$$

$$\begin{aligned}
U &= S^\dagger \\
\langle \widetilde{v}_i|\widetilde{A}|\widetilde{v}_j\rangle &= \langle v_i|A|v_j\rangle = \langle v_i|U^\dagger \widetilde{A} U|v_j\rangle \\
\Rightarrow \widetilde{A} &= UAU^\dagger
\end{aligned}$$

Transformação unitária infinitesimal:

$U(\epsilon)$ é tal que

$$\begin{aligned}\lim_{\epsilon\to 0} U(\epsilon) &= U(0) = \mathbb{1} \\ \Rightarrow U(\epsilon) &= \mathbb{1} - i\epsilon G + ... \quad \text{e} \quad U^\dagger(\epsilon) = \mathbb{1} + i\epsilon G^\dagger + ...\end{aligned}$$

Como $U^\dagger U = UU^\dagger = \mathbb{1}$ temos

$$U^\dagger U = \mathbb{1} + i\epsilon G^\dagger - i\epsilon G + \mathcal{O}(\epsilon^2) \Rightarrow G^\dagger = G$$

Sob a transformação infinitesimal $U(\epsilon) = \mathbb{1} - i\epsilon G$ temos

$$\begin{aligned}\widetilde{A} &= UAU^\dagger \\ &= (1 - i\epsilon G)A(1 + i\epsilon G) \\ &= A - i\epsilon[G, A] \\ \Rightarrow \widetilde{A} - A &= -i\epsilon[G, A]\end{aligned}$$

Se $\epsilon \equiv \theta/N$ e $N \gg 1$, sucessivas aplicações de U nos levam a

$$U_N = \left(1 - i\frac{\theta}{N}G\right)^N$$

que no limite $N \to \infty$ se transforma em

$$U(\theta) = e^{-i\theta G}$$

Exemplo:

$$\begin{aligned}U(a) &= e^{-iPa/\hbar} \Rightarrow UQU^\dagger = e^{-iPa/\hbar} Q e^{iPa/\hbar} \\ &= Q - \frac{ia}{\hbar}[P, Q] = Q - a\end{aligned}$$

onde usamos a fórmula de Baker-Hausdorff

$$e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} = B + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \underbrace{[A, [A, ...[A, B]]]}_{n \text{ comutadores}}.$$

Então, como $Q|q\rangle = q|q\rangle$ podemos escrever

$$UQU^\dagger U|q\rangle = qU|q\rangle \Rightarrow (Q - a)U|q\rangle = qU|q\rangle$$

$$\text{ou} \quad QU|q\rangle = (q + a)U|q\rangle \Rightarrow U|q\rangle = |q + a\rangle \quad \text{e} \quad U^\dagger|q\rangle = |q - a\rangle$$

Assim,

$$\langle q|U|\psi\rangle = \langle q - a|\psi\rangle = \psi(q - a)$$

Produto tensorial:

Sejam $\mathcal{E}_1$ e $\mathcal{E}_2$ dois espaços de estados.

$\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \equiv \{|\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi(2)\rangle \text{ tal que } |\varphi(1)\rangle \in \mathcal{E}_1 \text{ e } |\varphi(2)\rangle \in \mathcal{E}_2\}$.

i) produto linear:

$$(\lambda|\varphi(1)\rangle) \otimes |\varphi(2) = \lambda\,(|\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi(2))$$

ii) distributivo:

$$|\varphi(1)\rangle \otimes (|\varphi_1(2)\rangle + |\varphi_2(2)\rangle) = |\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi_1(2)\rangle + |\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi_2(2)\rangle$$

iii) Se $\dim \mathcal{E}_1 = N_1$ e $\dim \mathcal{E}_2 = N_2 \Rightarrow \dim[\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2] = N_1 N_2$

iv) Expansão em uma base $\in \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$: $|\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi(2)\rangle = \sum_{ij} a_i b_j |u_i(1)\rangle \otimes |v_j(2)\rangle$

Se $|\psi\rangle \in \mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \neq |\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi(2)\rangle$ podemos ter $|\psi\rangle = \sum_{ij} c_{ij} |u_i(1)\rangle \otimes |v_j(2)\rangle$ que é o chamado estado *emaranhado*

v) Produto escalar:

$$[\langle\varphi'(1)| \otimes \langle\varphi'(2)|]\,[|\varphi(1)\rangle \otimes |\varphi(2)\rangle] = \langle\varphi'(1)|\varphi(1)\rangle\langle\varphi'(2)|\varphi(2)\rangle$$

vi) Operadores:

$$\begin{aligned}
A(1)\,[|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] &= A(1)|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \\
(A(1) \otimes B(2))\,[|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] &= A(1)|\varphi(1)\rangle \otimes B(2)|\chi(2)\rangle \\
\Rightarrow \widetilde{A}(1) = A(1) \otimes \mathbb{1}(2) \quad &\text{e} \quad \widetilde{B}(2) = \mathbb{1}(1) \otimes B(2) \\
A(1)|\psi\rangle &= \lambda|\psi\rangle
\end{aligned}$$

$|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ é resolvido por

$$|\psi_{nl}^{(i)}\rangle = |\varphi_n^{(i)}(1)\rangle \otimes |\chi_l(2)\rangle$$

onde

$$A(1)|\varphi_n^{(i)}(1)\rangle = \lambda_n |\varphi_n^{(i)}(1)\rangle$$

e $|\chi_l(2)\rangle$ é um elemento qualquer de uma base de $\mathcal{E}_2$.

Aplicação:

De posse desta ferramenta matemática, podemos voltar à experiência de Stern-Gerlach. Como vimos, representamos a função de onda por

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_\uparrow(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_\downarrow(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Usando a notação de espaço de estados $\mathcal{E}$ podemos escrever que $\mathcal{E} = \mathcal{E}(\mathbf{r}) \otimes \mathcal{E}_s$ ($|\mathbf{r}\rangle \otimes |\alpha\rangle$ onde $\alpha = \uparrow$ ou $\downarrow$) e portanto

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \sum_\alpha \int \psi_\alpha(\mathbf{r})\{|\mathbf{r}\rangle \otimes |\alpha\rangle\} d^3r \\
\Rightarrow \langle\mathbf{r}|\psi\rangle &\equiv |\psi(\mathbf{r})\rangle = \psi_\uparrow(\mathbf{r})|\uparrow\rangle + \psi_\downarrow(\mathbf{r})|\downarrow\rangle
\end{aligned}$$

Note que $\langle\mathbf{r}|\psi\rangle \equiv |\psi(\mathbf{r})\rangle$ é ainda um estado (e não apenas uma componente $\psi(\mathbf{r})$) porque $\in \mathcal{E}_s$!

Como os valores medidos de μ_z são $\pm\mu_B$ podemos representá-lo pela matriz 2×2 que atua em $\mathcal{E}_s$ dada por

$$\mu_z = \mu_B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow \mu_z|\uparrow\rangle = \mu_B|\uparrow\rangle \text{ e } \mu_z|\downarrow\rangle = -\mu_B|\downarrow\rangle$$

Vimos ainda que dado um feixe no estado $|\uparrow\rangle$ ou $|\downarrow\rangle$ podemos medir μ_x ou μ_y bastando para tanto girar o aparato convenientemente. O resultado será o mesmo que obtivemos na direção $\hat{\mathbf{z}}$, só que com diferentes intensidades. Portanto, μ_x e μ_y devem também ser representados por matrizes hermitianas 2×2 com autovalores μ_B (ainda na base $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$).

A forma mais geral de uma matriz hermitiana 2×2 é

$$\begin{pmatrix} a & b^* \\ b & c \end{pmatrix} = \frac{a+c}{2}\mathbb{1} + \frac{a-c}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & b^* \\ b & 0 \end{pmatrix}$$

o que mostra que a escolha natural para μ_x e μ_y seria a base das matrizes da forma

$$\begin{pmatrix} 0 & b^* \\ b & 0 \end{pmatrix}$$

cujos auto valores são ± 1. Desta forma

$$\det\begin{pmatrix} \lambda & -b^* \\ -b & \lambda \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 - |b|^2 = 0 \Rightarrow \lambda = \pm 1 \Leftrightarrow b = e^{i\alpha}$$

Para que μ_x e μ_y venham futuramente gozar de algumas propriedades desejáveis, vamos escolher $\alpha = 0$ ou $\alpha = \pi/2$. Então,

$$\mu_x = \mu_B\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mu_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

As matrizes aqui introduzidas são as matrizes de Pauli

$$\sigma_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \ ; \ \sigma_y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \ ; \ \sigma_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Assim podemos escrever o operador vetorial $\boldsymbol{\mu}$ como

$$\boldsymbol{\mu} = \mu_B(\sigma_x\hat{\mathbf{x}} + \sigma_{\mathbf{y}}\hat{\mathbf{y}} + \sigma_{\mathbf{z}}\hat{\mathbf{z}})$$

A base inicialmente escolhida para $\mathcal{E}_s$, $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$, é por construção composta de auto estados de σ_z. Se quisermos escrever os auto estados de σ_x e σ_y devemos diagonalizá-las convenientemente. É um exercício trivial mostrar que os auto estados $|\pm\rangle_x$ e $|\pm\rangle_y$ tais que

$$\sigma_x|\pm\rangle_x = \pm 1|\pm\rangle_x \quad \text{e} \quad \sigma_y|\pm\rangle_y = \pm 1|\pm\rangle_y$$

são escritos em função de $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ como

$$|\pm\rangle_x = \frac{|\uparrow\rangle \pm |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad |\pm\rangle_y = \frac{|\uparrow\rangle \pm i|\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

Onde usamos que $\langle\uparrow|\uparrow\rangle = \langle\downarrow|\downarrow\rangle = 1$ e $\langle\uparrow|\downarrow\rangle = \langle\downarrow|\uparrow\rangle = 0$.

Na realidade podemos escrever o operador momento magnético em qualquer direção $\hat{\mathbf{n}}$ que desejarmos através de

$$\mu_n = \boldsymbol{\mu}\cdot\hat{\mathbf{n}} = \mu_{\mathbf{B}}(\sigma_{\mathbf{x}}\cos\varphi\sin\theta + \sigma_{\mathbf{y}}\sin\varphi\sin\theta + \sigma_{\mathbf{z}}\cos\theta)$$

Onde usamos que $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{x}}\sin\theta\cos\varphi + \hat{\mathbf{y}}\sin\theta\sin\varphi + \hat{\mathbf{z}}\cos\theta$.

Temos então

$$\mu_n = \mu_B \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix},$$

que tem auto valores $\pm\mu_B$ e auto estados

$$\begin{aligned} |+\rangle_n &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\varphi/2} |\uparrow\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\varphi/2} |\downarrow\rangle \\ |-\rangle_n &= -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\varphi/2} |\uparrow\rangle + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\varphi/2} |\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Em particular, se $\varphi = 0$, temos:

$$\begin{aligned} |+\rangle_n &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |\uparrow\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |\downarrow\rangle \\ |-\rangle_n &= -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |\uparrow\rangle + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |\downarrow\rangle \end{aligned}$$

e, consequentemente, a matriz de rotação de um ângulo θ destes objetos ($|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$) em torno de $\hat{y}$ é

$$U(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix}$$

o que nos leva a $U(2\pi) = -\mathbb{1}$. Portanto, ao girarmos objetos do tipo $|\alpha\rangle$ de 2π encontramos o estado $-|\alpha\rangle$ que evidencia o fato de estes estados não serem vetores em 2-D. Estes estados são chamados *spinores*.

As nossas expressões nos levam naturalmente às intensidades obtidas numa experiência de Stern-Gerlach para medir μ_z de partículas inicialmente polarizadas em qualquer direção $\hat{\mathbf{n}}$.

Estas intensidades são proporcionais às probabilidades da experiência com uma única partícula*,

$$P_\uparrow = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad \text{e} \quad P_\downarrow = \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right).$$

Propriedades das matrizes de Pauli:

i) Auto valores $= \pm 1$

ii) $\det \sigma_i = -1$

iii) $\operatorname{tr} \sigma_i = 0$

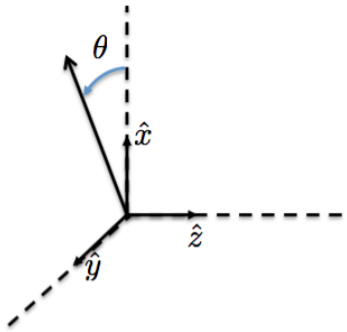
iv) $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbb{1}$

v) $\sigma_k \sigma_j = \delta_{kj}\mathbb{1} + i \sum_l \epsilon_{kjl}\ \sigma_l \ \Rightarrow\ [\sigma_k, \sigma_j] = 2i \sum_l \epsilon_{kjl}\ \sigma_l$

vi) $\sigma_i \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i$ se $i \neq j \ \Rightarrow\ \{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 0$ se $i \neq j$

vii) $\sigma_x \sigma_y \sigma_z = i\mathbb{1}$

viii) $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B})$

(*) Lembre-se que para a polarização de fótons

$$P(\hat{x}) = \cos^2\theta \quad \text{e} \quad P(\hat{y}) = \sin^2\theta$$