I.4) Os postulados da mecânica quântica

Na mecânica clássica sabemos que o estado de um sistema físico em um instante t é determinado pelo conjunto $\{q_i(t), p_i(t)\}$ de coordenadas generalizadas e seus respectivos momentos lineares. Consequentemente, qualquer grandeza física, $A(q_i, p_i, t)$, fica automaticamente determinada uma vez que conheçamos $q_i(t)$ e $p_i(t)$. Por outro lado, dado o conjunto $\{q_i(t_0), p_i(t_0)\}$ num instante t_0 , podemos conhecer $\{q_i(t), p_i(t)\}$ através das equações de Hamilton:

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i \quad e \quad \frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i. \quad (I.4.1)$$

Na mecânica quântica o problema também é conhecer:

- i) O estado físico;
- ii) O resultado da medida de grandezas físicas;
- iii) A dinâmica do estado físico.

O item (iii) será abordado mais adiante, mas, sobre os ítens (i) e (ii) acima, podemos, à luz do que experiências nos proporcionam, enunciar os seguintes postulados:

1º Postulado:

O estado físico em t é dado por $|\psi(t)\rangle$.

2º Postulado:

A uma dada grandeza física \mathcal{A} associamos um operador observável A ($A=A^{\dagger}$ etc.).

3º Postulado:

O único resultado possível da medida de A é um dos auto valores de A: $A|u_n\rangle=a_n|u_n\rangle$.

4º Postulado:

Ao efetuarmos uma medida da grandeza \mathcal{A} em um sistema descrito por $|\psi\rangle$ (normalizado), a probabilidade de encontrarmos o auto valor a_n (não degenerado) de A é dada por

$$P(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2 \quad (I.4.2)$$

Caso o auto valor seja degenerado

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^{(i)} | \psi \rangle|^2$$
 onde $i = 1, ..., g_n$ (I.4.3)

Já no caso do espectro de A ser contínuo, $A|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$, a possibilidade de que o resultado da medida de \mathcal{A} seja encontrado entre α e $\alpha + d\alpha$ é dada por

$$dP(\alpha) = |\langle \alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha \quad (I.4.4)$$

5º Postulado (redução do pacote de onda)

Se a medida de A resultar no auto valor a_n de A, o estado físico logo após a medida é dado por

$$|\widetilde{\psi}\rangle = \frac{\mathbb{P}_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\mathbb{P}_n|\psi_n\rangle}} \quad (I.4.5)$$

onde $\mathbb{P}_n = |u_n\rangle\langle u_n|$.

Caso o auto valor seja degenerado

$$\mathbb{P}_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^{(i)}\rangle\langle u_n^{(i)}|$$

Finalmente, no caso contínuo, o novo estado é dado por

$$|\widetilde{\psi}\rangle = \frac{\Delta \mathbb{P}_{\alpha}|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\Delta \mathbb{P}_{\alpha}|\psi\rangle}}$$
 onde $\Delta \mathbb{P}_{\alpha} = \int_{\alpha}^{\alpha+\Delta\alpha} d\alpha \; |\alpha\rangle\langle\alpha|$ (I.4.6)

Note que sempre usamos que $\langle \psi | \mathbb{P}^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbb{P} | \psi \rangle$.

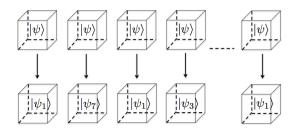
Como já dissemos antes, a dinâmica será abordada separadamente. Assim, uma vez enunciados os postulados vamos nos concentrar em algumas questões deles decorrentes.

i) Medida e preparação:

O processo de medida de \mathcal{A} do sistema S é o resultado da interação de S com um outro sistema M via o observável A associado a \mathcal{A} . O efeito desta interação é descrito pelos postulados 3, 4 e 5.

A maneira de entendermos estes postulados é a seguinte: suponhamos que temos um ensemble de \mathcal{N} sistemas idênticos que resultam dos mesmos processos físicos. Dizemos, então, que cada membro do ensemble é descrito por um mesmo estado físico $|\psi\rangle$ no instante imediatamente anterior à medida. Como resultado desta medida (liga-se e desliga-se a interação com M em $\Delta t \to 0$) temos que

onde
$$\sum_{i} n_{i} = \mathcal{N} \Rightarrow P(a_{k}) = \frac{n_{k}}{\mathcal{N}} \text{ e } |\psi_{k}\rangle \equiv \frac{\mathbb{P}_{n}|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\mathbb{P}_{k}|\psi\rangle}}$$



Antes da medida tínhamos

$$|\psi\rangle = \sum_{kp} c_k^{(p)} |u_k^{(p)}\rangle,$$

onde

$$\sum_{kp} |c_k^{(p)}|^2 = 1.$$

Desta forma podemos interpretar

$$\sum_{p} |c_k^{(p)}|^2 = P(a_k)$$

Se efetuarmos novas medidas sobre o mesmo ensemble resultante da medida anterior, podemos afirmar que, com certeza, nos n_k elementos cujo estado é $|\psi_k\rangle$ o resultado da medida de A será a_k $(k=1,2,...,\infty)$.

Se destes elementos filtrarmos aqueles que resultaram em um auto valor a_k específico, temos duas situações

- a) $g_k = 1 \Rightarrow$ o sistema já está preparado em $|u_k\rangle$.
- b) $g_k \neq 1 \Rightarrow$ a base do subespaço $\leftrightarrow a_k$ não está univocamente determinada. Entretanto, podemos escolher um $2^{\mathbb{Q}}$ operador B tal que [A, B] = 0 e efetuar a medida de B, o que não altera a_k , pois $B|u_k^{(r)}\rangle \in$ ao subespaço de a_k .

Estes dois observáveis são ditos compatíveis¹, pois podem ser medidos simultaneamente. Os auto estados comuns a A e B serão denotados por $|a_k,b_k,j\rangle$ onde $B|a_k,b_l,j\rangle=b_l|a_k,b_l,j\rangle$ e j é a degenerescência ainda presente. Se j=1, o sistema está preparado em $|u_k^{(i)}\rangle=|a_k,b_l\rangle$. Mas, se $j\neq 1$ devemos repetir o procedimento até encontrarmos um CCOC formado por A,B,C,...,Q com auto estados $|a_k,b_l,...,q_s\rangle$ univocamente determinados. Dizemos, então, que o sistema está preparado em $|u_k^{(i)}\rangle=|a_k,b_l,...,q_s\rangle$ onde a degenerescência g_k foi rotulada (levantada) por auto valores das medidas de B,C,...,Q.

Se quisermos medir $\Gamma \notin$ ao CCOC acima, tal que $\Gamma |\gamma_n\rangle = \gamma_n |\gamma_n\rangle$ devemos escrever $|u_k^{(i)}\rangle$ nesta nova base, ou seja,

$$|u_k^{(i)}\rangle = \sum_n |\gamma_n\rangle\langle\gamma_n|a_k, b_l, ..., q_s\rangle$$
 (I.4.7)

e a probabilidade de medirmos γ_n será $P(\gamma_n)$ dada por

$$P(\gamma_n) = |\langle \gamma_n | a_k, b_l, ..., q_s \rangle|^2. \quad (I.4.8)$$

Um exemplo de preparação já foi visto na experiência de Stern-Gerlach com $A = \sigma_z$ (já um CCOC) e $\Gamma = \sigma_x$.

ii) Valores médios e dispersão numa medida:

Dado um observável A sabemos que o valor médio de sua medida é

$$\langle A \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} P(a_n) a_n.$$
 (I.4.9)

Sabendo que o sistema foi inicialmente preparado no estado

$$|\psi\rangle = \sum_{in} c_n^{(i)} |u_n^{(i)}\rangle, \quad (I.4.10)$$

onde $c_n^{(i)} = \langle u_n^{(i)} | \psi \rangle$, podemos escrever (postulado 4):

$$\langle A \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} P(a_n) a_n = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^{(i)} | \psi \rangle|^2$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sum_{i=1}^{g_n} \langle \psi | u_n^{(i)} \rangle \langle u_n^{(i)} | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | \sum_n \sum_i A | u_n^{(i)} \rangle \langle u_n^{(i)} | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | A | \psi \rangle \text{ se } \langle \psi | \psi \rangle = 1. \quad \text{(I.4.11)}$$

No caso contínuo,

$$\langle A \rangle = \int \alpha dP(\alpha) = \langle \psi | A | \psi \rangle, \quad (I.4.12)$$

onde

$$dP(\alpha) = \rho(\alpha)d\alpha = \psi^*(\alpha)\psi(\alpha)d\alpha$$

A dispersão dos auto valores medidos em torno do valor médio é dada por

$$\Delta A \equiv \sqrt{(\Delta A)^2},$$

$$\begin{array}{rcl} A|a_n,b_p,i\rangle & = & a_n|a_n,b_p,i\rangle \\ B|a_n,b_p,i\rangle & = & b_p|a_n,b_p,i\rangle \\ & \mathrm{e}~|\psi\rangle & = & \displaystyle\sum_{npi} c_{npi}|a_n,b_p,i\rangle, \end{array}$$

pode-se mostrar que

$$\begin{array}{c} |\psi\rangle \xrightarrow{A} |\psi'\rangle \xrightarrow{B} |\psi''\rangle \\ |\psi\rangle \xrightarrow{B} |\varphi'\rangle \xrightarrow{A} |\varphi''\rangle \end{array} \right\} |\psi''\rangle = |\varphi''\rangle$$

 $^{^1}$ dois observáveis A e B são ditos compatíveis quando [A,B]=0, o que implica em podermos fazer medidas simultâneas dos observáveis A e B a eles associados. Ou seja, como

onde

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2, \quad (I.4.13)$$

e os valores médios dos operadores são calculados com (I.4.11 e 12)

Um teorema importante sobre a dispersão (ou incerteza) da medida de observáveis é que quando $A, B \in C$ são tais que [A, B] = iC temos,

$$\Delta A \Delta B \ge \frac{|\langle C \rangle|}{2}$$
. (I.4.14)

Demonstração:

Sejam $A|\psi\rangle = |u\rangle$ e $B|\psi\rangle = |v\rangle$

Pela desigualdade de Schwarz
$$||u||^2||v||^2 \ge |\langle u|v\rangle|^2$$

Como $A = A^{\dagger}$ e $B = B^{\dagger}$
$$\begin{cases} ||u||^2 = \langle \psi|A^2|\psi\rangle \\ ||v||^2 = \langle \psi|B^2|\psi\rangle \end{cases}$$

$$\begin{split} &\Rightarrow \quad \langle \psi | A^2 | \psi \rangle \langle \psi | B^2 | \psi \rangle \geq |\langle \psi | AB | \psi \rangle|^2 \\ &= \quad \left| \langle \psi | \frac{AB + BA}{2} | \psi \rangle + i \langle \psi | \frac{-i(AB - BA)}{2} | \psi \rangle \right|^2 \\ &= \quad \left| \langle \psi | \frac{AB + BA}{2} | \psi \rangle + i \langle \psi | \frac{C}{2} | \psi \rangle \right|^2 \\ &= \quad \left| \frac{\langle \{A, B\} \rangle}{2} \right|^2 + \left| \frac{\langle C \rangle}{2} \right|^2 \geq \frac{|\langle C \rangle|^2}{4}, \end{split}$$

pois se $z = x + iy \longrightarrow x^2 + y^2 \ge x^2$ ou y^2 . Assim.

$$\langle A^2 \rangle \langle B^2 \rangle \ge \frac{|\langle C \rangle|^2}{4}$$

e se substituirmos $A \to A - \langle A \rangle$ e $B \to B - \langle B \rangle$ teremos

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \ge \frac{|\langle C \rangle|^2}{4} \Longrightarrow \Delta A \Delta B \ge \frac{|\langle C \rangle|}{2}.$$

Um exemplo já bem conhecido deste teorema é que como $[x,p]=i\hbar$ temos $x\equiv A,\,p\equiv B,\,e\ C\equiv\hbar$

$$\Rightarrow \Delta x \Delta p \ge \frac{\hbar}{2}$$

que é o princípio da incerteza de Heisenberg.

iii) Estados puros e misturas estatísticas

Antes da medida, como já vimos,

$$|\psi\rangle = \sum_{nk} c_n^{(k)} |u_n^{(k)}\rangle$$

e

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_{nk} a_n |c_n^{(k)}|^2.$$

Depois de efetuada a medida sabemos que n_i elementos do ensemble \in ao subespaço correspondente a a_i , onde $\sum n_i = \mathcal{N}.$

Portanto, antes da medida o ensemble considerado pode ser representado por um ket $|\psi\rangle$, o que não acontece depois da medida quando há probabilidade a priori de termos n_i/\mathcal{N} elementos de ensemble representados por kets $\mathbb{P}_i |\psi\rangle/\sqrt{\langle\psi|\mathbb{P}_i|\psi\rangle}$.

Quando o ensemble representativo do sistema puder ser representado por um único ket $|\psi\rangle$ o sistema encontra-se em um estado puro. Em caso contrário diz-se que o sistema está em uma mistura estatística.

Para efeito de medida de operadores que comutam com A, não há diferença entre os ensembles. Entretanto, o mesmo não pode ser dito para operadores B tais que $[A, B] \neq 0$.

Exemplo: Consideremos a experiência de Stern-Gerlach com

$$|\psi\rangle = \frac{|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} = |+\rangle_x \Rightarrow \langle \sigma_x \rangle = 1 \text{ e } \langle \sigma_z \rangle = 0.$$

Consideremos agora 50% dos membros do ensemble em $|\uparrow\rangle$ e 50% em $|\downarrow\rangle$. $\langle\sigma_z\rangle$ é ainda nulo, mas agora $\langle\sigma_x\rangle$ também é nulo! Note que nos dois casos $P(\uparrow)=P(\downarrow)=1/2$. Neste caso que aqui tratamos $A=\sigma_z$ e $B=\sigma_x$ e $[\sigma_x,\sigma_z]\neq 0$.

Vamos formalizar um pouco mais o conceito de mistura estatística.

Consideremos o observável A tal que $A|u_n\rangle=a_n|u_n\rangle$. Para simplificar, consideremos a_n não degenerado. Em caso contrário podemos escolher um CCOC que especifique univocamente o auto estado $|u_n\rangle$. Após realizarmos a medida de A temos n_i elementos de ensemble em $|u_i\rangle$, ou seja, medimos a_i com a probabilidade $|\langle u_i|\psi\rangle|^2=n_i/\mathcal{N}$.

Vamos agora medir B tal que $B|v_n\rangle=b_n|v_n\rangle$ no ensemble resultante depois de medir A. Temos n_k membros do ensemble em $|u_k\rangle$ e

$$|u_k\rangle = \sum_{n'} |v_{n'}\rangle \underbrace{\langle v_{n'}|u_k\rangle}_{c_{n'}^{(k)}}, \quad (I.4.15)$$

e podemos definir a probabilidade de encontrar b_n na medida de B no k-ésimo subensemble como

$$P_k(b_n) = |\langle v_n | u_k \rangle|^2 = |c_n^{(k)}|^2.$$
 (I.4.16)

Então, a média de B no k-ésimo subensemble é

$$\langle B \rangle_k = \langle u_k | B | u_k \rangle = \sum_n b_n |c_n^{(k)}|^2, \quad (I.4.17)$$

o que implica em que a média no emsemble seja dada por

$$\langle B \rangle = \sum_{k} \frac{n_k}{\mathcal{N}} \langle B \rangle_k, \quad (\text{I.4.18})$$

o que é diferente de $\langle \psi | B | \psi \rangle$, mesmo que

$$|\psi\rangle = \sum d_k |u_k\rangle$$

com

$$|d_k|^2 = \frac{n_k}{\mathcal{N}}.$$

Neste caso

$$\langle \psi | B | \psi \rangle = \sum_{n} \langle \psi | v_{n} \rangle \langle v_{n} | \psi \rangle b_{n}$$

$$= \sum_{n} |\langle v_{n} | \psi \rangle|^{2} b_{n}$$

$$= \sum_{n} \left| \sum_{k} d_{k} \langle v_{n} | u_{k} \rangle \right|^{2} b_{n}$$

$$= \sum_{n} \left| \sum_{k} d_{k} c_{n}^{(k)} \right|^{2} b_{n}$$

$$= \sum_{k} |d_{k}|^{2} \sum_{k} b_{n} |c_{n}^{(k)}|^{2} + \sum_{k \neq k'} d_{k} d_{k'}^{*} \sum_{n} b_{n} c_{n}^{(k)} c_{n}^{(k')*}. \quad (I.4.19)$$

$$= \sum_{k} |d_{k}|^{2} \sum_{k} b_{n} |c_{n}^{(k)}|^{2} + \sum_{k \neq k'} d_{k} d_{k'}^{*} \sum_{n} b_{n} c_{n}^{(k)} c_{n}^{(k')*}. \quad (I.4.19)$$

Assim vemos que a (I.4.18) é composta por

 $\langle B \rangle_k \rightarrow \text{medida num estado puro (subensemble } k)$

 $\langle B \rangle \rightarrow \text{medida numa mistura (clássica) de subensembles com probabilidades } p_k = \frac{n_k}{N}$

$$\langle B \rangle = \sum_{k} \underbrace{p_{k}}_{\text{clássico}} \langle B \rangle_{k} = \sum_{k} \langle u_{k} | B | u_{k} \rangle p_{k} = \sum_{nk} \langle u_{k} | u_{n} \rangle \langle u_{n} | B | u_{k} \rangle p_{k}$$

$$= \operatorname{tr} \left[B \sum_{k} p_{k} | u_{k} \rangle \langle u_{k} | \right] = \operatorname{tr} (B \hat{\rho}) = \operatorname{tr} (\hat{\rho} B) \quad (I.4.20)$$

onde

$$\hat{\rho} \equiv \sum_{k} p_k |u_k\rangle \langle u_k| \quad (\text{I.4.21})$$

é o chamado operador densidade.

Em geral $\hat{\rho} = \sum_{\psi} p_{\psi} |\psi\rangle\langle\psi|$, onde ψ denota o conjunto de parâmetros que rotulam o estado $|\psi\rangle$. Estes estados não são necessariamente ortogonais. Na base $|u_k\rangle$ acima, $\hat{\rho}$ é diagonalizável e quando $p_k = 1$ temos um estado puro e $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$.

iv) O operador densidade e as suas propriedades.

Como vimos na seção anterior o operador densidade definido em (I.4.21) é tal que

$$\langle v_n | \hat{\rho} | v_m \rangle = \sum_k p_k c_n^{(k)} c_m^{(k)*} \quad (I.4.22)$$

Note que $\hat{\rho}$ não é diagonal em $|v_n\rangle$.

Propriedades:

a) $\hat{\rho}$ é hermitiano:

$$\hat{\rho}^{\dagger} = \sum_{k} p_{k}^{*} [|u_{k}\rangle\langle u_{k}|]^{\dagger} = \sum_{k} p_{k} |u_{k}\rangle\langle u_{k}| = \hat{\rho}$$

$$\Rightarrow \hat{\rho} = \hat{\rho}^{\dagger} \quad (I.4.23)$$

b)
$$\operatorname{tr} \hat{\rho} = 1 \\ \operatorname{tr} \hat{\rho} = \sum_{n} \langle v_n | \hat{\rho} | v_n \rangle = \sum_{k} p_k \sum_{n} |c_n^{(k)}|^2 = 1 \quad (I.4.24)$$

c) Quando o estado é puro,
$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$$

 $\hat{\rho}^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \hat{\rho} \Rightarrow \hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ (I.4.25)

d)
$$\langle v|\hat{\rho}|v\rangle \ge 0$$

$$\langle v|\hat{\rho}|v\rangle = \sum_{k} p_{k} \langle v|u_{k}\rangle \langle u_{k}|v\rangle = \sum_{k} \underbrace{p_{k}}_{>0} |\langle u_{k}|v\rangle|^{2} \ge 0$$
 (I.4.26)

Exemplos:

a) O operador estatístico:

$$\hat{\rho} = \sum_{n} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} |u_n\rangle\langle u_n|$$

onde

$$Z = \sum_{n} e^{-\beta E_n}$$

é a função de partição do sistema

$$Z = \operatorname{tr} e^{-\beta H}$$
.

b) Como distinguir entre o estado puro e a mistura estatística? Se A é tal que

$$A|\psi_1\rangle = a_1|\psi_1\rangle$$

 $A|\psi_2\rangle = a_2|\psi_2\rangle$

 \mathbf{e}

$$|\psi\rangle = c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle \Rightarrow P_1 = |c_1|^2 \text{ e } P_2 = |c_2|^2.$$

Medindo A não podemos distinguir entre

$$\hat{\rho}_P = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} |c_1|^2 & c_1c_2^* \\ c_1^*c_2 & |c_2|^2 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{\rho}_M = \begin{pmatrix} |c_1|^2 & 0 \\ 0 & |c_2|^2 \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \langle A \rangle = \operatorname{tr}(\hat{\rho}_P A) = \operatorname{tr}(\hat{\rho}_M A) = a_1 |c_1|^2 + a_2 |c_2|^2.$$

Mas se medirmos

$$B = \left(\begin{array}{cc} b_1 & b_0 \\ b_0 & b_2 \end{array}\right)$$

tal que $[A, B] \neq 0$ $(a_1 \neq a_2 e b_0 \neq 0)$, temos

$$\operatorname{tr}(\hat{\rho}_P B) = b_1 |c_1|^2 + b_2 |c_2|^2 + 2\operatorname{Re}(b_0 c_1 c_2^*) \equiv \langle B \rangle_P \quad (I.4.27)$$

 \mathbf{e}

$$\operatorname{tr}(\hat{\rho}_M B) = b_1 |c_1|^2 + b_2 |c_2|^2 \equiv \langle B \rangle_M \quad (I.4.28)$$

e $\langle B \rangle_P \neq \langle B \rangle_M$. Um exemplo concreto é o de $A = \sigma_z$ e $B = \sigma_x$. O estado $|\psi_1\rangle \equiv |\uparrow\rangle$ e $|\psi_2\rangle = |\downarrow\rangle \Rightarrow |\psi\rangle = |+\rangle_n$

 $\hat{\rho}_P$ é um estado puro $|+\rangle_n$ $_n\langle+|$ e $\hat{\rho}_M$ uma mistura.

À luz do que introduzimos podemos generalizar alguns dos postulados anteriormente enunciados:

1º Postulado

O estado físico é determinado pelo operador densidade $\hat{\rho}$. Note que apesar de hermitiano, $\hat{\rho}$ representa o estado físico e não um observável.

4º Postulado

A probabilidade de se encontrar o auto valor a_n de um observável A tal que $A|u_n\rangle=a_n|u_n\rangle$ é

$$P(a_n) = \sum_{k} p_k |\langle u_n | v^{(k)} \rangle|^2 \quad (I.4.29)$$

Onde p_k é probabilidade (clássica) de se encontrar $|v^{(k)}\rangle$. Então,

$$P(a_n) = \sum_{k} p_k \langle u_n | v^{(k)} \rangle \langle v^{(k)} | u_n \rangle$$

$$= \langle u_n | \sum_{k} p_k | v^{(k)} \rangle \langle v^{(k)} | u_n \rangle$$

$$= \sum_{n'm'} \langle u_n | \omega_{n'} \rangle \langle \omega_{n'} | \hat{\rho} | \omega_{m'} \rangle \langle \omega_{m'} | u_n \rangle$$

$$= \sum_{n'm'} \rho_{n'm'} \underbrace{\langle \omega_{m'} | u_n \rangle \langle u_n | \omega_{n'} \rangle}_{(\mathbb{P}_n)_{m'n'}}$$

$$= \operatorname{tr}(\hat{\rho} \mathbb{P}_n) \quad (I.4.30)$$

Assim $P(a_n) = \operatorname{tr}(\hat{\rho}\mathbb{P}_n)$ que, no caso de $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ um estado puro, reduz-se ao 4° postulado na sua forma anterior.

5º Postulado

Como vimos antes.

$$|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = \frac{\mathbb{P}_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\mathbb{P}_n|\psi\rangle}}$$

e é esta a forma que devemos generalizar para $\hat{\rho}$. $\hat{\rho}' = ?$. Obviamente, $|\psi\rangle\langle\psi| \to |\psi'\rangle\langle\psi'| = \mathbb{P}_n |\psi\rangle\langle\psi|\mathbb{P}_n$

$$\Rightarrow \sum_{\psi} p_{\psi} |\psi\rangle\langle\psi| \to \sum_{\psi} p_{\psi} \mathbb{P}_n |\psi\rangle\langle\psi| \mathbb{P}_n = \mathbb{P}_n \hat{\rho} \mathbb{P}_n$$

Normalizando:

$$\frac{\mathbb{P}_{n}\hat{\rho}\mathbb{P}_{n}}{\operatorname{tr}\left(\mathbb{P}_{n}\hat{\rho}\mathbb{P}_{n}\right)} = \frac{\mathbb{P}_{n}\hat{\rho}\mathbb{P}_{n}}{\operatorname{tr}\left(\mathbb{P}_{n}\hat{\rho}\right)}$$

$$\Rightarrow \hat{\rho}' = \frac{\mathbb{P}_{n}\hat{\rho}\mathbb{P}_{n}}{\operatorname{tr}\left(\mathbb{P}_{n}\hat{\rho}\right)} \quad (I.4.31)$$

Há inúmeras aplicações para o operador densidade, mas, certamente, uma das mais importantes é a da medida de observáveis em subsistemas. Mais tarde veremos também a sua relevância no estudo da dinâmica de subsistemas. Consideremos o problema de 2 sistemas cujos kets podem ser definidos nos espaços \mathcal{E}_1 e \mathcal{E}_2 . O sistema composto por 1 e 2 é definido no espaço produto tensorial $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$. Se

$$|\psi\rangle = |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \in \mathcal{E}$$

então podemos escrever

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = [|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] [\langle\varphi(1)| \otimes \langle\chi(2)|]
= |\varphi(1)\rangle\langle\varphi(1)| \otimes |\chi(2)\rangle\langle\chi(2)|
= \hat{\rho}(1) \otimes \hat{\rho}(2) \quad (I.4.32)$$

Note que, em geral,

$$\hat{\rho}(i) = \sum_{mn} \rho_{mn} |u_m(i)\rangle \langle u_n(i)| \quad (1.4.33)$$

onde

$$\rho_{mn} = \langle u_m | \hat{\rho} | u_n \rangle$$

onde i = 1, 2 é a forma de $\hat{\rho}$ em 1 ou 2.

Para o produto tensorial \mathcal{E} a forma mais geral da expressão de $\hat{\rho}$ é:

$$\hat{\rho} = \sum_{mn,kl} \rho_{mn,kl} |u_m(1)\rangle \langle u_n(1)| \otimes |v_k(2)\rangle \langle v_l(2)| \quad (I.4.34)$$

onde

$$\rho_{mn,kl} \equiv \langle u_m(1)v_k(2)|\hat{\rho}|u_n(1)v_l(2)\rangle$$

Note que $\rho_{mn,kl} = \rho_{mn}(1)\rho_{kl}(2)$ no caso de $\hat{\rho} = \hat{\rho}(1) \otimes \hat{\rho}(2)$. Entretanto, a forma não fatorizável $\rho_{mn,kl} \neq \rho_{mn}(1)\rho_{kl}(2)$ é a mais geral para a expressão de $\hat{\rho}$ no espaço $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$. Vamos agora efetuar uma média da medida de um certo observável A que atua apenas em $\mathcal{E}(1)$, ou seja, $A = A(1) \otimes \mathbb{1}(2)$. Como sabemos

$$\begin{split} \langle A \rangle &= \operatorname{tr} \left(\hat{\rho} A \right) = \sum_{km} \langle u_m v_k | \hat{\rho} A | u_m v_k \rangle \\ &= \sum_{km} \langle u_m(1) v_k(2) | \sum_{m'n',k'l'} \rho_{m'n',k'l'} | u_{m'}(1) \rangle \langle u_{n'}(1) | \otimes | v_{k'}(2) \rangle \langle v_{l'}(2) | \sum_{m''n''k''} A_{m''n''} | u_{m''}(1) \rangle \langle u_{n''}(1) | \dots \\ & \dots \otimes | v_{k''}(2) \rangle \langle v_{k''}(2) | u_m(1) v_k(2) \rangle \\ &= \langle u_m(1) | u_{m'}(1) \rangle \langle v_k(2) | v_{k'}(2) \rangle \langle u_{n'}(1) | u_{m''}(1) \rangle \langle v_{l'}(2) | v_{k''}(2) \rangle \langle v_{k''}(2) | v_k(2) \rangle \dots \\ & \dots \langle u_{n''}(1) | u_m(1) \rangle \rho_{m'n',k'l'} A_{m''n''} \end{split}$$

Usando que $\langle u_m(1)|u_n(1)\rangle = \delta_{mn}$ e $\langle v_k(2)|v_l(2)\rangle = \delta_{kl}$ temos

$$\langle A \rangle = \sum_{kmn} \rho_{mn,kk} A_{nm} \quad (I.4.35)$$

Aqui podemos definir um operador que se refere apenas ao subespaço $\mathcal{E}(1)$ mas que carrega a influência do sistema (2) a ele correlacionado. Este é o chamado operador densidade reduzido de (1) dado por

$$\widetilde{\rho}(1) \equiv \operatorname{tr}_2 \widehat{\rho} = \sum_{mnk} \rho_{mn,kk} |u_m(1)\rangle \langle u_n(1)|$$

$$\Rightarrow \widetilde{\rho}_{mn}(1) = \sum_k \rho_{mn,kk} \quad (I.4.36)$$

Assim,

$$\langle A(1)\rangle = \operatorname{tr}_1(\widetilde{\rho}(1)A) = \sum_{mn} \sum_k \rho_{mn,kk} A_{nm}$$

indica o valor médio de um observável em parte do sistema composto $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$. Um exemplo bem comum é o do estudo das propriedades do campo eletromagnético (1) no interior de uma cavidade (2). Como nenhuma medida deve ser efetuada nas variáveis da cavidade podemos tomar o traço sobre elas. Como resultado o operador $\tilde{\rho}(1)$ descreve o campo sujeito à influência da cavidade. Este sistema é importante no estudo da teoria quântica da medida que começamos a abordar com um exemplo bem simples.

Vamos considerar um sistema de 2 níveis (1) descrito por um estado puro

$$|\psi\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$$

Vamos considerar agora um sistema (2) que pode ser acoplado ao anterior e que se encontra num estado de referência $|0\rangle$. O estado do sistema composto é

$$|\phi\rangle = |\psi\rangle \otimes |0\rangle = (a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle) \otimes |0\rangle \quad (I.4.37)$$

Pela distributividade de produto direto temos

$$|\phi\rangle = a|\uparrow\rangle \otimes |0\rangle + b|\downarrow\rangle \otimes |0\rangle$$
 (I.4.38)

Suponhamos que a interação entre (1) e (2) seja tal que o estado $|\uparrow\rangle$ se correlacione com o estado $|U\rangle$ do sistema (2) enquanto que $|\downarrow\rangle$ se correlacione com $|D\rangle$. Então

$$|\phi'\rangle = a|\uparrow\rangle \otimes |U\rangle + b|\downarrow\rangle \otimes |D\rangle$$
 (I.4.39)

Aqui, $|\phi'\rangle$ representa o estado inicial $|\phi\rangle$ depois de ter evoluido por um certo tempo sujeito a uma interação entre (1) e (2). O operador densidade $\hat{\rho}'$ correspondente ao sistema global é

$$|\phi'\rangle\langle\phi'| = |a|^2|\uparrow\rangle\langle\uparrow|\otimes|U\rangle\langle U| + ab^*|\uparrow\rangle\langle\downarrow|\otimes|U\rangle\langle D| + a^*b|\downarrow\rangle\langle\uparrow|\otimes|D\rangle\langle U| + |b|^2|\downarrow\rangle\langle\downarrow|\otimes|D\rangle\langle D| \quad (I.4.40)$$

Como vimos antes, qualquer observação a ser efetuada apenas em (1) depende do operador densidade reduzido deste subsistema, que é dado por

$$\widetilde{\rho}(1) = \langle U|\phi'\rangle\langle\phi'|U\rangle + \langle D|\phi'\rangle\langle\phi'|D\rangle
= |a|^{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + ab^{*}|\uparrow\rangle\langle\downarrow|\langle D|U\rangle + a^{*}b|\downarrow\rangle\langle\uparrow|\langle U|D\rangle +
+ |b|^{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow||\langle U|D\rangle|^{2} + |a|^{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow||\langle U|D\rangle|^{2} +
+ ab^{*}|\uparrow\rangle\langle\uparrow|\langle D|U\rangle + a^{*}b|\downarrow\rangle\langle\uparrow|\langle U|D\rangle +
+ |b|^{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow|$$
(I.4.41)

onde usamos que $\langle U|U\rangle=\langle D|D\rangle=1$. Vemos então que se $\langle U|D\rangle\approx 0$ o operador densidade reduzido se torna uma mistura estatística

$$\widetilde{\rho}(1) = |a|^2 |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |b|^2 |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \quad (\mathrm{I}.4.42)$$

O mesmo ocorre se fizermos a observação em (2)

$$\widetilde{\rho}(2) = |a|^2 |U\rangle\langle U| + |b|^2 |D\rangle\langle D| \quad (I.4.43)$$

Um exemplo concreto do que vimos aqui é a experiência de Stern-Gerlach. Neste caso o estado $|0\rangle$ de (2) é tal que a sua representação de coordenadas é um pacote de onda de um elétron incidente no magneto. O gradiente do campo acopla o momento magnético do elétron com o seu movimento espacial e assim, $|U\rangle$ e $|D\rangle$ são estados cuja representação de coodenadas descreve pacotes que são defletidos para cima $(|U\rangle)$ ou para baixo $(|D\rangle)$.

$$\langle \mathbf{r}|U\rangle = \psi_{\uparrow}(\mathbf{r})$$

$$\langle \mathbf{r}|D\rangle = \psi_{\downarrow}(\mathbf{r})$$

$$\Rightarrow \langle \mathbf{r}|\phi\rangle = a\phi(\mathbf{r})|\uparrow\rangle + b\phi(\mathbf{r})|\downarrow\rangle$$

$$\text{interação com } \mathbf{B} \downarrow$$

$$\langle \mathbf{r}|\phi'\rangle = a\psi_{\uparrow}(\mathbf{r})|\uparrow\rangle + b\psi_{\downarrow}(\mathbf{r})|\downarrow\rangle$$

Como a uma distância grande do magneto os pacotes $\psi_{\uparrow}(\mathbf{r})$ e $\psi_{\downarrow}(\mathbf{r})$ são praticamente ortogonais, teremos (veja (I.4.42)):

$$\widetilde{\rho}(1) = \begin{pmatrix} |a|^2 & ab^* \\ a^*b & |b|^2 \end{pmatrix} \to \widetilde{\rho}'(1) = \begin{pmatrix} |a|^2 & 0 \\ 0 & |b|^2 \end{pmatrix} \quad (I.4.45)$$
antes da medida

Portanto, após decorrido o tempo necessário para $\langle U|D\rangle$ ou $\langle \psi_{\uparrow}|\psi_{\downarrow}\rangle=0$ a medida dos observáveis referentes apenas ao sistema (1) resultam, naturalmente, na transição (I.4.45) de um estado puro para uma mistura estatística. Este processo pode ter desdobramentos importantes como veremos a seguir.

Na interpretação ortodoxa (de Copenhagen) da mecânica quântica o processo específico da medida não é questionado. O aparato de medida é considerado clássico e o resultado da medida é dado pelos postulados 3, 4 e 5. Questionamentos de como se dá a redução do pacote de onda (postulado 5), por exemplo, são considerados sem sentido dentro da mecânica quântica.

Entretanto, qualquer que seja o aparelho de medida, ele também poderá ser descrito pela mecânica quântica já que, por mais complexo que possa ser, é composto por átomos, moléculas, campo de radiação, enfim, elementos que podem ser descritos pela mecânica quântica.

Podemos, então, tentar descrever a medida através da interação do sistema microscópico (1) com um complexo sistema (mas ainda assim quântico) de medida (2) como vimos acima, e usar o conjunto de regras que estabelecemos anteriormente. Esta abordagem é a chamada teoria quântica da medida.

Os estados $|U\rangle$ e $|D\rangle$ de $\mathcal{E}(2)$ referem-se agora a estados do complexo aparelho de medida. Portanto, o acoplamento de (1) e (2) nos leva a um estado do tipo $|\phi'\rangle$ em (I.4.39). Ora, sendo (2) um sistema complexo e muito provavelmente macroscópico, estamos diante de uma situação inusitada: uma superposição de estados macroscópicos distinguíveis, já que queremos associar a $|U\rangle$ e $|D\rangle$ situações macroscópicas distintas no aparelho de medida. Por exemplo, a posição de um ponteiro do medidor.

Foi exatamente uma situação como esta que gerou o debate conhecido como o paradoxo do gato de Schrödinger, onde uma sequência de eventos encapsulados em $|\uparrow\rangle$ se correlacionam com o estado $|U\rangle$ (gato vivo) enquanto que os encapsulados em $|\downarrow\rangle$ se correlacionam com o estado $|D\rangle$ (gato morto).

Obviamente não gostaríamos de ter uma superposição de possíveis posições de um ponteiro como resultado de uma medida.

Uma possível solução para este impasse é imaginar que $\mathcal{E}(2) = \mathcal{E}_R(2) \otimes \mathcal{E}_I(2)$ onde $\mathcal{E}_I(2)$ é o espaço dos estados que chamaremos de irrelevantes para a medida, ou seja, aqueles cujo traço será tomado no processo de medida. Assim,

$$|U\rangle = |U_B\rangle \otimes |U_I\rangle$$
 e $|D\rangle = |D_B\rangle \otimes |D_I\rangle$ (I.4.46)

e

$$|\phi'\rangle = a|\uparrow\rangle \otimes |U_B\rangle \otimes |U_I\rangle + b|\downarrow\rangle \otimes |D_B\rangle \otimes |D_I\rangle \quad (I.4.47)$$

Assumindo, então, que os estados macroscopicamente distinguíveis $|U_R\rangle$ e $|D_R\rangle$ correlacionam-se, respectivamente, com os estados irrelevantes $|U_I\rangle$ e $|D_I\rangle$ tais que $\langle U_I|D_I\rangle\approx 0$ temos (ver I.4.42)

$$\widetilde{\rho}(1, 2_R) = |a|^2 |\uparrow, U_R\rangle \langle \uparrow, U_R| + |b|^2 |\downarrow, D_R\rangle \langle \downarrow, D_R| \quad (\text{I}.4.48)$$

Ou seja, os estados $|U_R\rangle$ e $|D_R\rangle$, correlacionados com $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$, encontram-se numa mistura estatística, o que é bem mais razoável do ponto de vista clássico.

Obviamente, a destruição dos elementos não diagonais do operador densidade reduzido não é instantânea. O tempo gasto para a sua ocorrência é chamado de tempo de decoerência (ou descoerência) e depende da dinâmica de \mathcal{E} através da interação entre $\mathcal{E}_R(2)$ e $\mathcal{E}_I(2)$. Este tempo é, em geral, muito curto. Apesar do efeito de decoerência não resolver completamente o problema da medida em mecânica quântica ele, pelo menos, mostra como um estado puro do aparato de medida, correlacionado com um dado estado microscópico, pode se transformar numa mistura estatística numa escala de tempo extremamente curta.