

Física Quântica I / Mecânica Quântica

Ferramentas Matemáticas

Vítor M. Pereira

Departamento de Física | Universidade do Minho

2021/22 — 2º Sem

Lição 3

Revisão de conceitos: matrizes de Pauli, vetores e valores próprios

Matrizes de Pauli

Mudanças de base

Valores e vetores próprios

Espectro de matrizes Hermíticas

Se $f(z)$ for uma função analítica com série de Taylor convergente,

$$f(z) = f(0) + f'(0)z + \frac{1}{2!}f''(0)z^2 + \dots$$

define-se a função $f(A)$ de uma matriz **quadrada** A como sendo

$$f(A) \equiv f(0)I + f'(0)A + \frac{1}{2!}f''(0)A^2 + \dots$$

...o que, naturalmente, resulta numa matriz da mesma dimensão.

Por exemplo, se A for quadrada, para calcular e^A faríamos

$$e^z = 1 + z + \frac{1}{2!}z^2 + \frac{1}{3!}z^3 + \dots \quad \longrightarrow \quad e^A = I + A + \frac{1}{2!}A^2 + \frac{1}{3!}A^3 + \dots$$

Funções de matrizes **diagonais** (e só neste caso!) são particularmente simples de obter:

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & a_2 & 0 & \dots \\ \vdots & & & \ddots \end{bmatrix} \quad \longrightarrow \quad f(A) = \begin{bmatrix} f(a_1) & 0 & 0 & \dots \\ 0 & f(a_2) & 0 & \dots \\ \vdots & & & \ddots \end{bmatrix}$$

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

Algumas propriedades destas matrizes de Pauli:

- São Hermíticas.
- Têm traço nulo: $\text{Tr}(\sigma_x) = \text{Tr}(\sigma_y) = \text{Tr}(\sigma_z) = 0$.
- Não comutam entre si: $[\sigma_p, \sigma_q] = 2i \varepsilon_{pqr} \sigma_r$.
- $\sigma_p^2 = I$ ($\forall p = x, y, z$).

Nas aplicações relacionadas com **spin** 1/2, vai ser prático definir um chamado **vetor de Pauli** :

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x \mathbf{u}_x + \sigma_y \mathbf{u}_y + \sigma_z \mathbf{u}_z \quad (\mathbf{u}_{x,y,z} : \text{vetores Cartesianos unitários})$$

O seu produto interno com um vector Cartesiano $\mathbf{a} = a \mathbf{n} = a (n_x \mathbf{u}_x + n_y \mathbf{u}_y + n_z \mathbf{u}_z)$ é então **definido** como sendo a matriz 2×2 seguinte:

$$\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma} = a_x \sigma_x + a_y \sigma_y + a_z \sigma_z = a (n_x \sigma_x + n_y \sigma_y + n_z \sigma_z) \quad (\text{onde } n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1)$$

Uma aplicação importante destas definições é seguinte função de matrizes de Pauli:

$$e^{i\alpha(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})} = I \cos \alpha + i(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sin \alpha \quad (\text{nota que } \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \text{ e } I \text{ são matrizes } 2 \times 2)$$

Transitando de matrizes e vetores para espaços vetoriais

Para continuarmos, são necessários diferentes níveis de abstração:

- 1 Abstrair de um sistema de coordenadas em particular;
- 2 Abstrair de $D = 3$ para qualquer dimensão D ;
- 3 Abstrair completamente do espaço Euclidiano.

A partir deste ponto, serão sempre assumidas bases ortonormais:

$$\vec{u}_i \cdot \vec{u}_j = \delta_{ij} \quad (\text{condição de orto+normalização})$$

Introduzimos também uma nova notação para vetores:

em vez de \vec{a} escreveremos $|a\rangle$

... e o mesmo para os vetores unitários que definem a base do espaço:

em vez de \vec{u}_i escreveremos $|u_i\rangle$

Portanto, um vetor será genericamente expresso como

$$|a\rangle = \sum_n \underset{\substack{\uparrow \\ \text{componente } n}}{a_n} \overset{\substack{\downarrow \\ \text{vet. unitário } n}}{|u_n\rangle} = a_1|u_1\rangle + a_2|u_2\rangle + \dots$$

A escolha da base é livre (vetores) — exemplo Cartesiano

Vetores físicos têm existência **independentemente** do sistema de coordenadas escolhido:

$$|\mathbf{a}\rangle = a_1|\mathbf{u}_1\rangle + a_2|\mathbf{u}_2\rangle = a'_1|\mathbf{u}'_1\rangle + a'_2|\mathbf{u}'_2\rangle$$

As duas bases estão linearmente relacionadas através de:

$$|\mathbf{u}_i\rangle = \sum_j R_{ji}|\mathbf{u}'_j\rangle, \quad \text{onde} \quad R_{ji} \equiv \langle \mathbf{u}'_j | \cdot | \mathbf{u}_i \rangle$$

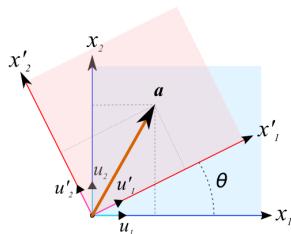
e as componentes a_i e a'_i através de

$$\mathbf{a}' \equiv \begin{bmatrix} a'_1 \\ a'_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} \equiv R \mathbf{a}$$

A matriz R :

- permite transitar entre as bases $\{\mathbf{u}_i\}$ e $\{\mathbf{u}'_i\}$;
- é **unitária**, logo $R^\dagger = R^{-1}$;
- portanto, se

$$\mathbf{a}' = R \mathbf{a} \quad \text{então} \quad \mathbf{a} = R^{-1} \mathbf{a}' = R^\dagger \mathbf{a}'$$



Exemplo: vetores Cartesianos em 2D

$$|\mathbf{u}'_x\rangle = \cos \theta |\mathbf{u}_x\rangle + \sin \theta |\mathbf{u}_y\rangle$$

$$|\mathbf{u}'_y\rangle = -\sin \theta |\mathbf{u}_x\rangle + \cos \theta |\mathbf{u}_y\rangle$$

$$R = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

O aspeto chave

Escrever um vetor como (componentes)

$$\mathbf{a} \rightarrow \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}$$

assume uma base $\{|\mathbf{u}_i\rangle\}$ **específica**.

A escolha da base é livre (tensores) — exemplo Cartesiano

O mesmo acontece com propriedades físicas descritas por **tensores** e representadas por **matrizes**.

Consideremos uma grandeza física \mathcal{M} que estabelece uma relação linear entre duas grandezas vetoriais $|a\rangle$ e $|b\rangle$. Em termos de componentes, essa relação significa:

$$a = M b \quad \text{numa dada base } \{u_i\}$$

Mas, se optar por outra base $\{u'_i\}$:

$$\begin{aligned} a &= M b \\ \Leftrightarrow R a &= R M b \\ \Leftrightarrow a' &= R M (R^{-1} b') \\ \Leftrightarrow a' &= M' b' \end{aligned}$$

Ou seja, a matriz que representa \mathcal{M} passa a ser:

$$M' = R M R^{-1} \quad \Leftrightarrow \quad M'_{ij} = \sum_{pq} R_{ip} M_{pq} (R^{-1})_{qj}$$

Portanto, a **relação** linear

$$a = M b \quad \Leftrightarrow \quad a' = M' b'$$

é **independente** da escolha de base.

Exemplo: rotação de um corpo rígido

ℓ e ω relacionam-se segundo

$$\ell = I \omega$$

(I : tensor/matriz momento de inércia)

Num **dado** sistema de coordenadas:

$$\begin{bmatrix} \ell_1 \\ \ell_2 \\ \ell_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_{11} & I_{12} & I_{13} \\ I_{21} & I_{22} & I_{23} \\ I_{31} & I_{32} & I_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \omega_3 \end{bmatrix}$$

O aspeto chave

- Os **números** ℓ_i , I_{ij} , e ω_j estão associados a uma **base específica**!
- ...mas a relação física entre ℓ , I e ω permanece em qualquer base.

Valores e vetores próprios de matrizes Hermíticas

Na relação linear envolvendo os vetores \mathbf{a} , \mathbf{b} e a matriz H ,

$$\mathbf{a} = H \mathbf{b}$$

acontece, regra geral, o seguinte ao vetor \mathbf{b} depois de multiplicado por H :

- o efeito de multiplicar \mathbf{b} por H é **transformar** o vetor \mathbf{b} ;
- a matriz H pode rodar, esticar, inverter, etc. o vetor \mathbf{b} , resultando num novo vetor \mathbf{a} ;
- esse novo \mathbf{a} pode ser completamente arbitrário e diferente do vetor original \mathbf{b} .

No entanto, é legítimo questionar se, dada uma matriz H ,

existe algum vetor \mathbf{v} para o qual $H \mathbf{v} = \lambda \mathbf{v}$, $\lambda \in \mathbb{C}$ (um número) ?

Geometricamente isto significaria

A ação de H em \mathbf{v} devolve um vetor que é novamente \mathbf{v} , multiplicado por um fator de escala λ .

Isto é, $H \mathbf{v}$ é paralelo a \mathbf{v} .

E... tais vetores existem?...

Para as matrizes de interesse em MQ (Hermíticas e unitárias), eles existem **sempre**!

São designados por **vetores próprios** ou **auto-vetores** (EN: eigenvectors).

Motivação para a relevância de valores/vetores próprios em MQ

Em breve ficaremos a saber que:

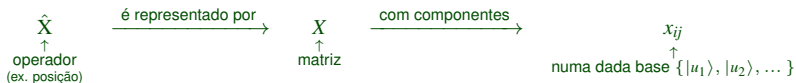
- 1 O estado de um sistema físico num dado instante é especificado por um

vetor de estado: $|\psi(t)\rangle$

- 2 O conjunto de todos os estados possíveis de um sistema cobre um **espaço vetorial**:

o espaço de estados, também conhecido como espaço de Hilbert

- 3 Quantidades como a posição (\mathcal{X}), energia, momento, etc. são descritas por **operadores Hermíticos**, designados “**observáveis**”, definidos nesse espaço de estados:



- 4 A base natural para expressar quantidades físicas consiste no conjunto completo de

auto-vetores de uma observável de interesse (ex. posição, energia, etc.)

- 5 Para prevermos os **resultados** possíveis numa medição da quantidade \mathcal{X} , é necessário

determinar todos os **auto-valores** e **auto-vetores** do operador (matriz) correspondente

Motivação mais pragmática

Em MQ, tudo depende e “gira em torno” de auto-vetores e auto-valores!

Aviso...

Doravante, despedimo-nos de matrizes/vetores com componentes reais.

As nossas matrizes serão, em geral, **complexas**.

Começemos pela definição de autovetor:

$$H\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v} \quad \Leftrightarrow \quad (H - \lambda I)\mathbf{v} = 0 \quad (I = \text{identidade})$$

Esta equação é nada mais do que um **sistema homogéneo de equações lineares** onde as incógnitas são as componentes v_i de \mathbf{v} :

$$\begin{bmatrix} h_{11} - \lambda & h_{12} & \cdots \\ h_{21} & h_{22} - \lambda & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

Tem solução?

sim, desde que $\det(H - \lambda I) = 0$ (eq. característica)

Todos os valores de λ que satisfazem esta condição são **autovalores** de H .

Note-se que:

- se H tem dimensão $n \times n$ então $\det(H - \lambda I)$ é um polinómio de ordem n em λ ;
- existirão nesse caso exatamente n soluções para $\lambda \in \mathbb{C}$ da eq. característica (teorema);
- portanto, **qualquer** matriz Hermítica $n \times n$ tem n **autovalores**;
- mas **não necessariamente distintos**!

Assim que determinarmos os n autovalores da matriz H de dimensão $n \times n$,

$$\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\} \quad \text{tais que} \quad \det(H - \lambda_\alpha I) = 0$$

estamos em condições de extrair os autovetores associados a cada autovalor.

Se λ_α forem todos diferentes, a cada um corresponde um vetor v_α “único”, que resolve o sistema homogéneo

$$(H - \lambda_\alpha I)v_\alpha = 0$$

A determinação dos conjuntos

$$\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\} \quad \text{e} \quad \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$$

constitui uma tarefa central e recorrente em MQ.

Ao conjunto de autovalores $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$ chama-se espectro da matriz H .

Note-se que:

- Se v_α é solução de $(H - \lambda_\alpha I)v_\alpha = 0$, então o vetor $c v_\alpha$ também o é $\forall c \in \mathbb{C}$
- Os autovetores v_α são “únicos” exceto por um múltiplo global (um fator de escala).
- Esta liberdade é parcialmente restringida impondo que v_α sejam normalizados à unidade.

Consideremos a matriz 2×2 seguinte

$$H = \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{é Hermítica?})$$

1 Cálculo dos autovalores:

$$H - \lambda I = \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \lambda & -i \\ i & 1 - \lambda \end{pmatrix} \xrightarrow{\det(H - \lambda I) = 0} \begin{vmatrix} 1 - \lambda & -i \\ i & 1 - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

Equação caraterística:

$$(1 - \lambda)(1 - \lambda) + i^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = \{0, 2\}$$

2 Cálculo dos autovetores:

escrevendo $v_\alpha \rightarrow \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ e substituindo, $(H - \lambda_\alpha I)v_\alpha = \begin{pmatrix} 1 - \lambda_\alpha & -i \\ i & 1 - \lambda_\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0$

Colocando $\lambda_1 = 0$, resolvendo para a e b , e normalizando de acordo com $|a|^2 + |b|^2 = 1$:

$$\lambda_1 = 0 : \quad v_1 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \lambda_2 = 2 : \quad v_2 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

(o caso $\lambda_2 = 2$ obtém-se de modo análogo).

Aspectos importantes do espectro de matrizes *Hermíticas*

- 1 Os autovalores são **sempre** (e todos) números **reais**.
- 2 Se $\lambda_\alpha \neq \lambda_\beta$, os autovetores \mathbf{v}_α e \mathbf{v}_β associados são **automaticamente ortogonais**.
- 3 É **sempre** possível construir n vetores linearmente independentes usando o conjunto completo de autovetores $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$.

Os n autovetores normalizados de qualquer matriz Hermítica definem uma **base** para um espaço vetorial de dimensão n .

Dada uma **qualquer** matriz Hermítica H , existe uma matriz **unitária** U tal que

$$H' \equiv U H U^{-1} = U H U^\dagger \quad \text{é diagonal!} \quad \text{e} \quad H' = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$$

Essa matriz U (também de dimensão $n \times n$) é dada através dos autovetores **normalizados** de H por

$$U^\dagger = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_n \\ \downarrow & \downarrow & \cdots & \downarrow \\ \downarrow & \downarrow & \cdots & \downarrow \end{pmatrix} \quad (\text{as colunas de } U^\dagger \text{ são os autovetores de } H)$$

Vejamos isto explicitamente com o *exemplo do slide anterior*.

$$U^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix}, \quad U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{pmatrix} \quad \longrightarrow \quad U H U^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \checkmark = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$$

Determinação da base própria de uma matriz Hermítica

Um processo que deverá ficar **interiorizado e automatizado** daqui em diante:

$$\begin{array}{ccccccc} H & \longrightarrow & \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\} & \longrightarrow & \{v_1, v_2, \dots, v_n\} & \longrightarrow & U^\dagger = \begin{pmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_n \\ \downarrow & \downarrow & \vdots & \downarrow \end{pmatrix} \\ \uparrow & & \uparrow & & \uparrow & & \\ \text{matriz Hermítica} & & \text{autovalores} & & \text{autovetores / base própria} & & \text{matriz de transformação} \end{array}$$

Qualquer outra matriz pode ser representada nesta base própria através de U :

$$A' = U A U^\dagger$$

(generalização de uma rotação do sistema de coordenadas)

Exemplo

Escrever σ_z na base própria de H , usando o exemplo do slide anterior:

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \longrightarrow \sigma'_z = U \sigma_z U^\dagger = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Chegados aqui, é importante

- Certificarmo-nos de que percebemos as afirmações/resultados vistos até aqui para o problema de valores próprios de matrizes Hermíticas.
- Rever tudo isto no capítulo 3 do livro de T. L. Chow.
- Praticar!



A partir de agora, não esquecer que, para matrizes *Hermíticas*:

- 1 O espectro de autovalores é sempre **real**;
- 2 Se $\lambda_\alpha \neq \lambda_\beta$, então v_α são v_β **ortogonais**;
- 3 Se λ_α é uma raiz múltipla da eq. característica, dizemos que é um autovalor **degenerado**;
- 4 O conjunto normalizado de autovetores $\{v_\alpha\}$ constitui uma **base alternativa** para o espaço vetorial em questão.

Corolário importante para a matemática da MQ

Podemos sempre usar a base própria de **qualquer** matriz Hermítica como a base de referência para expressar todas as outras matrizes e vetores definidos no mesmo espaço.