Física Quântica I / Mecânica Quântica

Ferramentas Matemáticas

Vítor M. Pereira

Departamento de Física | Universidade do Minho

2021/22 — 2º Sem

Lição 2

Revisão de conceitos: probabilidades, números complexos, matrizes, vetores/valores próprios.

Duas classes de espaço de eventos:

- Discreto — os diferentes eventos são contáveis: $\{u_1, u_2 \ldots, u_N\}$
- Contínuo — eventos distribuídos num intervalo contínuo: $\in [x_a, x_b]$

Dois tipos de distribuição de probabilidade:

- Discreta — $p_i = \{p_1, p_2 \ldots, p_N\}$
- Contínua — $p(x)$ é uma função definida no intervalo $x \in [x_a, x_b]$

Densidades de probabilidade são estritamente positivas: $p_i \geq 0$ ou $p(x) \geq 0$.

Normalização, valores esperados, desvio padrão:

Caso discreto

$$1 = \sum_{i=1}^{N} p(u_i)$$

$$\langle f(u) \rangle = \sum_{i=1}^{N} p(u_i) f(u_i)$$

$$\sigma_u = \sqrt{\langle u^2 \rangle - \langle u \rangle^2}$$

Caso contínuo

$$1 = \int_{x_a}^{x_b} p(x) dx$$

$$\langle f(x) \rangle = \int_{x_a}^{x_b} p(x) f(x) dx$$

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

Probabilidades — exemplos

Exemplo discreto: resultados do lançamento de dois dados

Espaço de eventos (possíveis somas dos 2 dados):

$$\{s_i\} = \{2,\ 3,\ 4,\ 5,\ 6,\ 7,\ 8,\ 9,\ 10,\ 11,\ 12\}$$

Probabilidades respetivas:

$$p(s_i) = \{1/36,\ 1/18,\ 1/12,\ 1/9,\ 5/36,\ 1/6,\ 5/36,\ 1/9,\ 1/12,\ 1/18,\ 1/36\}$$

Valor esperado num lançamento de 2 dados:

$$\langle s \rangle = \sum_{\{s_i\}} s_i\, p(s_i) = 7, \qquad \sigma_s = \sqrt{\langle s^2 \rangle - \langle s \rangle^2} \simeq 2.42$$

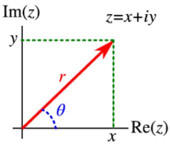
Exemplo contínuo: distribuição Gaussiana (ou normal)

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\alpha^2}}, \qquad x \in (-\infty,\ +\infty)$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\, p(x)\, dx = x_0, \qquad \sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \alpha$$

Número complexo $z \in \mathbb{C}$:

$$z = x + iy, \qquad i = \sqrt{-1}, \qquad (x, y) \in \mathbb{R}$$



Relação entre as representações polar e Cartesiana:

$$z = r\,e^{i\theta}, \qquad r \equiv |z| = \sqrt{x^2 + y^2}, \qquad \theta \equiv \arg(z) = \measuredangle(z,\, x)$$

Operações elementares (aplicam-se as propriedades associativa, comutativa, distributiva):

$$\begin{aligned}
\text{sejam}: &\quad z_1 = x_1 + iy_1, \qquad z_2 = x_2 + iy_2 \\
\text{adição}: &\quad z_1 + z_2 = (x_1 + x_2) + i\,(y_1 + y_2) \\
\text{multiplicação}: &\quad z_1\, z_2 = (x_1 x_2 - y_1 y_2) + i(x_1 y_2 + x_2 y_1) \\
\text{conjugação complexa}: &\quad z = x + iy \quad \longrightarrow \quad z^* = x - iy \\
&\quad z = Ae^{i\theta} \quad \longrightarrow \quad z^* = Ae^{-i\theta} \\
\text{módulo}: &\quad |z|^2 = zz^* \quad \longrightarrow \quad z = x + iy \Rightarrow |z|^2 = x^2 + y^2 \\
\text{inverso}: &\quad \frac{1}{z} = \frac{z^*}{z\,z^*} = \frac{z^*}{|z|^2}
\end{aligned}$$

Função de *uma* variável complexa $f : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$

$$z = x + iy \quad \longrightarrow \quad f(z) = u(x,y) + i\,v(x,y) \qquad (u,v) \in \mathbb{R}$$

As funções elementares são analíticas em praticamente todo o seu domínio e, por isso, podem ser *extendidas* ao plano complexo, preservando a forma da série de Taylor associada,

$$f(z) = f(z_0) + f'(z_0)\,(z - z_0) + \frac{f''(z_0)}{2!}\,(z - z_0)^2 + \cdots$$

Por exemplo:

$$e^z = 1 + z + \frac{z^2}{2!} + \frac{z^3}{3!} + \cdots$$

Desta série resulta, por exemplo, que se $\theta \in \mathbb{R}$ (fórmula de Euler):

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$$ [demonstra que é verdade]

e também que as propriedades conhecidas de análise real, como por exemplo

$$e^z = e^{x+iy} = e^x e^{iy} = e^x(\cos y + i\sin y)$$

e portanto, neste exemplo, a parte real e imaginária de e^z são

$$e^z = u(x,y) + iv(x,y) \quad \longrightarrow \quad u(x,y) = e^x\cos y \quad \text{e} \quad v(x,y) = e^x \sin y$$

Uma matriz A agrega números numa tabela regular:

$$A = [a_{ij}] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{M1} & a_{M2} & \cdots & a_{MN} \end{bmatrix} \qquad (a_{ij} \in \mathbb{C})$$

Operações elementares:

- Adição

$$C = A + B \Leftrightarrow c_{ij} = a_{ij} + b_{ij} \quad \longrightarrow \quad C = \begin{bmatrix} (a_{11}+b_{11}) & (a_{12}+b_{12}) & (a_{13}+b_{13}) & \cdots \\ (a_{21}+b_{21}) & (a_{22}+b_{22}) & (a_{23}+b_{22}) & \cdots \\ & \vdots & & \ddots \end{bmatrix}$$

- Multiplicação por um escalar/constante (ie. um número $\alpha \in \mathbb{C}$)

$$M = \alpha A \Leftrightarrow m_{ij} = \alpha\, a_{ij} \quad \longrightarrow \quad M = \alpha A = \begin{bmatrix} \alpha\, a_{11} & \alpha\, a_{12} & \alpha\, a_{13} & \cdots \\ \alpha\, a_{21} & \alpha\, a_{22} & \alpha\, a_{23} & \cdots \\ & \vdots & & \ddots \end{bmatrix}$$

- Produto de duas matrizes

$$C = A\,B \quad \Leftrightarrow \quad c_{ij} = \sum_k a_{ik} b_{kj}$$

- Comutador de duas matrizes (aparece repetidamente em MQ)

$$[A,\, B] = A\,B - B\,A$$ Importante: em geral, $[A,\, B] \neq 0$

Matrizes — índices

Seja A uma matriz de dimensão $M \times N$ (M linhas por N colunas):

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{M1} & a_{M2} & a_{M3} & \cdots & a_{MN} \end{bmatrix}$$

a_{ij} é chamado o "elemento ij da matriz A"

As operações elementares podem expressar-se em termos dos elementos de matriz e somas sobre *índices mudos* (EN: dummy index) com uma configuração apropriada. Por exemplo:

- Multiplicação da matriz A pelo vetor coluna u:

$$v = A \cdot u \quad \Leftrightarrow \quad v_i = \sum_j a_{ij} \, v_j$$

- Produto de duas matrizes A e B:

$$C = A \cdot B \quad \Leftrightarrow \quad c_{ij} = \sum_k a_{ik} \, b_{kj}$$

- Produto de p matrizes $M^{(p)}$ em sequência:

$$W = M^{(1)} \cdot M^{(2)} \cdot M^{(3)} \cdots M^{(p)} \quad \Leftrightarrow \quad w_{ij} = \sum_k \sum_l \cdots \sum_p m_{ik}^{(1)} \, m_{kl}^{(2)} \, m_{lm}^{(3)} \cdots m_{pj}^{(p)}$$

Matrizes — Kronecker e Levi-Civita

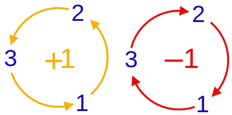
Dois “objetos” extremamente úteis na álgebra de matrizes/vetores:

- Delta de Kronecker: δ_{ij}

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \qquad \text{(elementos da matriz identidade)}$$

- Símbolo de Levi-Civita (em 3D): ϵ_{ijk}

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1, & (i,j,k) = (1,2,3),\ (2,3,1),\ (3,1,2) \\ -1, & (i,j,k) = (1,3,2),\ (2,1,3),\ (3,2,1) \\ 0, & \text{restantes casos} \end{cases}$$



Por exemplo, o produto vetorial (ou externo) de 2 vectores em 3D pode exprimir-se como

$$\boldsymbol{w} = \boldsymbol{u} \times \boldsymbol{v} \qquad \longrightarrow \qquad w_i = \sum_{j,k} \epsilon_{ijk}\, u_j\, v_k$$

[verifica que é verdade expandindo para cada componente]

Matrizes — definições

- Matriz diagonal:

$$D \text{ é diagonal se } d_{i\neq j} = 0 \quad \longrightarrow \quad D = \begin{bmatrix} d_{11} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & d_{22} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & d_{33} & \cdots \\ & \vdots & & \ddots \end{bmatrix} = \text{diag}(d_{11}, d_{22}, d_{33}, \ldots)$$

- Matriz identidade, I:

$$A\,I = A, \quad \forall A \quad \Rightarrow \quad I_{ij} = \delta_{ij} \quad \longrightarrow \quad I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & \cdots \\ & \vdots & & \ddots \end{bmatrix} = \text{diag}(1, 1, 1, \ldots)$$

- Matriz transposta (troca de linhas com colunas):

$$(A^\top)_{ij} = A_{ji} : \qquad A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \end{bmatrix} \quad \longrightarrow \quad A^\top = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} & \cdots \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \end{bmatrix}$$

- Regra para a transposta de um produto de matrizes

$$(ABC\cdots Z)^\top = Z^\top \cdots C^\top B^\top A^\top$$ (na ordem inversa!) [demonstra isto]

- Matrix conjugada complexa:

$$(A^*)_{ij} = A_{ij}^* \quad \longrightarrow \quad A^* = \begin{bmatrix} a_{11}^* & a_{12}^* & a_{13}^* & \cdots \\ a_{21}^* & a_{22}^* & a_{23}^* & \cdots \\ & \vdots & & \ddots \end{bmatrix}$$

- Matriz conjugada Hermítica (conjugada + transposta):

$$A^\dagger = A^*(A^*)^\top = (A^\top)^* \quad \longrightarrow \quad (A^\dagger)_{ij} = A_{ji}^* \quad \longrightarrow \quad A^\dagger = \begin{bmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* & a_{31}^* & \cdots \\ a_{12}^* & a_{22}^* & a_{32}^* & \cdots \\ & \vdots & & \ddots \end{bmatrix}$$

- Conjugada Hermítica do produto de matrizes:

$$(ABC\cdots)^\dagger = \cdots C^\dagger B^\dagger A^\dagger \ldots$$ (ordem inversa!) [porquê inversa?]

- Traço de uma matriz $m \times m$ (soma dos elementos da diagonal):

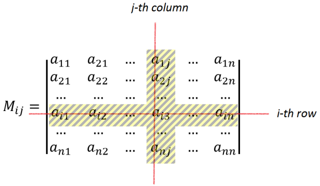
$$\mathrm{Tr}\,(A) = \sum_{i=1}^{m} a_{ii} \quad \longrightarrow \quad \mathrm{Tr}\,(A) \in \mathbb{C}$$

$$\mathrm{Tr}\,(A + B + \ldots) = \mathrm{Tr}\,A + \mathrm{Tr}\,B + \ldots,$$

$$\mathrm{Tr}\,(A\,B\,\cdots\,Y\,Z) = \mathrm{Tr}\,(Z\,A\,B\,\cdots\,Y) = \mathrm{Tr}\,(Y\,Z\,A\,B\,\cdots) = \text{etc.}$$ (propriedade cíclica) [demonstra]

- Menores de uma matriz A:

$$M_{ij} \equiv \det(A,\ \text{com a linha } i \text{ e coluna } j \text{ suprimidas})$$



- Determinante através dos menores (expansão de Laplace):

$$\det(A) = \sum_{j=1}^{m} (-1)^{i+j} a_{ij} M_{ij} \qquad \forall i \in \{1, \ldots, m\}$$

- Determinante de um produto de matrizes quadradas:

$$\det(A\,B \cdots Z) = \det(A)\ \det(B) \cdots \det(Z)$$

- Matriz inversa da matriz (quadrada) A:

$$A^{-1}A = AA^{-1} = I \quad \longrightarrow \quad (A^{-1})_{ij} = \frac{(-1)^{i+j} M_{ji}}{\det(A)}; \quad A^{-1} = \frac{1}{\det(A)} \begin{bmatrix} M_{11} & -M_{21} & M_{31} & \cdots \\ -M_{12} & M_{22} & -M_{32} & \cdots \\ & \vdots & & \ddots \end{bmatrix}$$

As seguintes classes de matrizes são especialmente importantes em física:

- Simétrica ($+$) ou anti-simétrica ($-$):

$$A^\top = \pm A \qquad \xrightarrow{\text{elementos}} \qquad a_{ij} = \pm a_{ji}$$

- Ortogonal:

$$A^{-1} = A^\top \qquad \Rightarrow \qquad AA^\top = A^\top A = I$$

- Hermítica:

$$A = A^\dagger \qquad \xrightarrow{\text{elementos}} \qquad a_{ij} = a_{ji}^*$$

- Unitária:

$$A^{-1} = A^\dagger \qquad \Rightarrow \qquad AA^\dagger = A^\dagger A = I$$

Matrizes Hermíticas e unitárias têm grande proeminência em MQ!

Exercício

Verifica que, se $s \in \mathbb{R}$, a matriz M abaixo é unitária

$$M = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} e^{is} & -e^{-is} \\ e^{is} & e^{-is} \end{bmatrix}$$

Se $f(z)$ for uma função analitica 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

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

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

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

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

Alugmas propriedades destas matrizes de Pauli:

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

Introduzimos também uma nova notação para vetores:

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

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

$$\text{em vez de} \quad \vec{\boldsymbol{u}}_i \quad \text{escreveremos} \quad |\boldsymbol{u}_i\rangle$$

Portanto, um vetor será genericamente expresso como

$$|\boldsymbol{a}\rangle = \sum_n \underset{\substack{\uparrow \\ \text{componente } n}}{a_n} \; \overset{\substack{\text{vet. unitário } n \\ \downarrow}}{|u_n\rangle} = a_1|\boldsymbol{u}_1\rangle + a_2|\boldsymbol{u}_2\rangle + \dots$$

Vetores físicos têm existência independentemente do sistema de coordenadas escolhido:

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

As duas bases estão linearmente relacionadas através de:

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

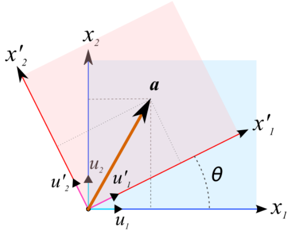
e as componentes a_i e a_i' através de

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

A matriz R:

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

$$\boldsymbol{a}' = R\,\boldsymbol{a} \qquad \text{então} \qquad \boldsymbol{a} = R^{-1}\,\boldsymbol{a}' = R^\dagger\,\boldsymbol{a}'$$



Exemplo: vetores Cartesianos em 2D

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

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

O aspeto chave

Escrever um vetor como (componentes)

$$\boldsymbol{a} \to \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}$$

assume uma base $\{|\boldsymbol{u}_i\rangle\}$ 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 $|\boldsymbol{a}\rangle$ e $|\boldsymbol{b}\rangle$. Em termos de componentes, essa relação significa:

$$\boldsymbol{a} = M\,\boldsymbol{b} \qquad \text{numa dada base } \{\boldsymbol{u}_i\}$$

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

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

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

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

Portanto, a relação linear

$$\boldsymbol{a} = M\,\boldsymbol{b} \qquad \Leftrightarrow \qquad \boldsymbol{a}' = M'\,\boldsymbol{b}'$$

é independente da escolha de base.

Exemplo: rotação de um corpo rígido

$\boldsymbol{\ell}$ e $\boldsymbol{\omega}$ relacionam-se segundo

$$\boldsymbol{\ell} = I\,\boldsymbol{\omega}$$

(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 $\boldsymbol{\ell}$, I e $\boldsymbol{\omega}$ permanece em qualquer base.

Valores e vetores próprios de matrizes

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

$$\boldsymbol{a} = H\,\boldsymbol{b}$$

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

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

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

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

Geometricamente isto significaria

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

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

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:

   $$\underset{\substack{\uparrow\\ \text{operador}\\ \text{(ex. posição)}}}{\hat{\mathrm{X}}} \xrightarrow{\text{é representado por}} \underset{\substack{\uparrow\\ \text{matriz}}}{X} \xrightarrow{\text{com componentes}} \underset{\substack{\uparrow\\ \text{numa dada base } \{|u_1\rangle,\, |u_2\rangle,\, \ldots\}}}{x_{ij}}$$

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.

Cálculo de autovalores e autovetores

Comecemos pela definição de autovetor:

$$H\,\boldsymbol{v} = \lambda\,\boldsymbol{v} \qquad \Leftrightarrow \qquad (H - \lambda I)\boldsymbol{v} = 0 \qquad (I = \text{identidade})$$

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

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

Tem solução?

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

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. caraterística (teorema);
- portanto, qualquer matriz Hermítica $n \times n$ tem n autovalores;
- mas não necessariamente distintos!

Cálculo de autovalores e autovetores

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

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

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

Se λ_α forem todos diferentes, a cada um corresponde um vetor $\boldsymbol{v}_\alpha$ "único", que resolve o sistema homogéneo

$$(H - \lambda_\alpha I)\boldsymbol{v}_\alpha = 0$$

A determinação dos conjuntos

$$\{\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n\} \qquad \text{e} \qquad \{\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$$

constitui uma tarefa central e recorrente em MQ.

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

Note-se que:

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

Consideremos a matriz 2×2 seguinte

$$H = \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix}$$ [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:

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

2. Cálculo dos autovetores:

escrevendo $v_\alpha \to \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ 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 $|a|^2 + |b|^2 = 1$:

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

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

Aspetos importantes do espectro de matrizes *Hermíticas*

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

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

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

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

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

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

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

Determinação da base própria de uma matriz Hermítica

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

$$\underset{\substack{\uparrow \\ \text{matriz Hermítica}}}{H} \longrightarrow \{\underset{\substack{\uparrow \\ \text{autovalores}}}{\lambda_1,\, \lambda_2,\, \ldots,\, \lambda_n}\} \longrightarrow \{\underset{\substack{\uparrow \\ \text{autovetores / base própria}}}{\boldsymbol{v}_1,\, \boldsymbol{v}_2,\, \ldots,\, \boldsymbol{v}_n}\} \longrightarrow U^\dagger = \underset{\text{matriz de transformação}}{\begin{pmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_n \\ \downarrow & \downarrow & \vdots & \downarrow \end{pmatrix}}$$

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:

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

Tempo de refletir...

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 $\boldsymbol{v}_\alpha$ são $\boldsymbol{v}_\beta$ ortogonais;
3. Se λ_α é uma raíz múltipla da eq. caraterística, dizemos que é um autovalor degenerado;
4. O conjunto normalizado de autovetores $\{\boldsymbol{v}_\alpha\}$ 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.