OPERADORES E PROBLEMA AOS VALORES PRÓPRIOS

Exemplo: operadores de spin

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Vectores e valores próprios do operador de spin:

$$\underbrace{\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_{\text{operador}}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \underbrace{\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}}_{\text{vector ou estado próprio}}$$

valor próprio

$$\underbrace{\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_{\hat{S}_z}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_y \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

os valores próprios decorrem da

$$\det\left[\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \mathbb{1}\lambda\right] = 0$$

$$\Leftrightarrow \det\left[\begin{pmatrix} -\lambda & -i\hbar/2 \\ i\hbar/2 & -\lambda \end{pmatrix}\right] = 0$$

$$\lambda^2 - \left(-i\frac{\hbar}{2}\right)\left(i\frac{\hbar}{2}\right) \Leftrightarrow \lambda^2 = \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\Rightarrow \boxed{\lambda = \pm\frac{\hbar}{2}.}$$

$$\cancel{\frac{\hbar}{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \pm\cancel{\frac{\hbar}{2}}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \pm\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} -ib \\ ia \end{pmatrix} = \pm\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$-ib = \pm a \Leftrightarrow b = \pm i a$$

$$|S_y = \hbar/2\rangle = \begin{pmatrix} a \\ ia \end{pmatrix} ; \quad |S_y = -\hbar/2\rangle = \begin{pmatrix} a \\ -ia \end{pmatrix}$$

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \Leftrightarrow a^2 + (ia)(-ia) = 1$$

$$\Leftrightarrow 2a^2 = 1 \Leftrightarrow a^2 = \frac{1}{2}$$

escolhendo $a > 0$: $a = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$$|S_y = +\hbar/2\rangle \equiv |\circlearrowright\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ +i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle\right)$$

$$|S_y = -\hbar/2\rangle \equiv |\circlearrowleft\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle - i|\downarrow\rangle\right)$$

—— " ——

$$\sigma_i^\dagger = \sigma_i \, ; \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$i \to x, y, z$

$$\sigma_y^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$\hat{O} = \hat{O}^\dagger \rightarrow$ eu digo que o operador é hermítico. E operadores hermíticos têm valores próprios reais.

$\hat{G} = \hat{G}^\dagger$: $\hat{G}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$

$\hookrightarrow$ reais

Se $\hat{G}$ representar uma grandeza física os λ's são os resultados possíveis das medidas.

Exemplo: Hamiltoneano com interacção.

$$H = H_0 + V = \underbrace{\begin{pmatrix} E_g & 0 \\ 0 & E_e \end{pmatrix}}_{H_0} + \begin{pmatrix} 0 & \beta \\ \beta^* & 0 \end{pmatrix}$$

H é hermítico. Desejamos os valores próprios de energia e os estados próprio de H.

$$\det\left[\begin{pmatrix} E_g & \beta \\ \beta^* & E_e \end{pmatrix} - E\mathbb{1}\right] = 0$$

$$\det\begin{bmatrix} (E_g - E) & \beta \\ \beta^* & (E_e - E) \end{bmatrix} = 0$$

$$(E_g - E)(E_e - E) - |\beta|^2 = 0$$

$$E^2 - E(E_g + E_e) + E_g E_e - |\beta|^2 = 0$$

$$E = \frac{1}{2}(E_g + E_e) \pm \frac{1}{2}\left[(E_g + E_e)^2 - 4(E_g E_e - |\beta|^2)\right]^{1/2}$$

$$E = \frac{1}{2}(E_g + E_e) \pm \frac{1}{2} \cdot$$

$$\cdot \left[E_g^2 + E_e^2 + 2E_e E_g - 4E_g E_e + 4|\beta|^2\right]^{1/2}$$

$$= \frac{1}{2}(E_g + E_e) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_g - E_e)^2 + 4|\beta|^2}$$

Se $\beta = 0$

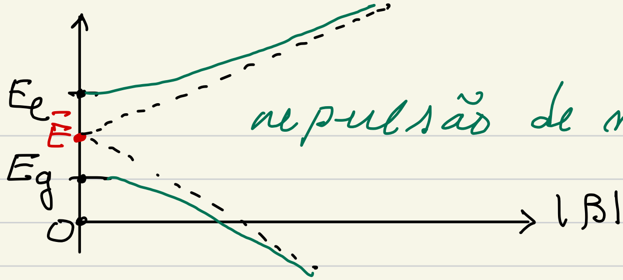
$$E = \frac{1}{2}(E_g + E_e) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_g - E_e)^2}$$

$$= \frac{1}{2}(E_g + E_e) \pm \frac{1}{2}|\underbrace{E_g - E_e}_{<0}|$$

$$= \frac{1}{2}(E_g + E_e) \pm \frac{1}{2}(E_e - E_g) \Leftrightarrow$$

$$E = \begin{cases} E_e \\ E_g \end{cases}$$

Se $\beta \neq 0$:



repulsão de níveis.

$|\beta| \to \infty \qquad \sqrt{\cdots} \to |\beta|$

$$E \longrightarrow \underbrace{\frac{E_e+E_g}{2}}_{\bar{E}} \pm \frac{1}{2}|\beta|$$

Terminado o cálculo dos valores próprios temos que calcular os vectores próprios:

$H = \begin{bmatrix} E_g & \beta \\ \beta^* & E_e \end{bmatrix}$ há dois valores próprios: $E_\pm$

$$\begin{bmatrix} E_g & \beta \\ \beta^* & E_e \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = E_\pm \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

temos a condição adicional: $|a|^2+|b|^2=1$

$$\begin{bmatrix} E_g \cdot a + \beta b \\ \beta^* a + E_e b \end{bmatrix} = E_\pm \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

Usando a primeira linha

$$E_g \cdot a + \beta \cdot b = E_\pm a$$

$$\Leftrightarrow (E_g - E_\pm) a = -\beta b$$

$$\Leftrightarrow a = \frac{-\beta}{E_g - E_\pm} \cdot b$$

temos a condição: $|a|^2 + |b|^2 = 1$

<u>a real:</u> (considerando β real)

$$\frac{\beta^2}{(E_g - E_\pm)^2} \cdot b^2 + b^2 = 1$$

$$b^2 \left[\frac{\beta^2}{(E_g - E_\pm)^2} + 1 \right] = 1$$

$$\Leftrightarrow b^2 = \frac{(E_g - E_\pm)^2}{\beta^2 + (E_g - E_\pm)^2}$$

$$\Leftrightarrow b_\pm = \sqrt{\frac{(E_g - E_\pm)^2}{\beta^2 + (E_g - E_\pm)^2}}$$

$$b_{\pm} = \frac{|E_g - E_{\pm}|}{\left[\beta^2 + (E_g - E_{\pm})^2\right]^{1/2}}$$

$$a_{\pm} = \frac{-\beta}{E_g - E_{\pm}} \, \frac{|E_g - E_{\pm}|}{\left[\beta^2 + (E_g - E_{\pm})^2\right]^{1/2}}$$

$$= - \frac{\beta \cdot \operatorname{sign}(E_g - E_{\pm})}{\left[\beta^2 + (E_g - E_{\pm})^2\right]^{1/2}}$$

$$\begin{bmatrix} a_{\pm} \\ b_{\pm} \end{bmatrix} = \frac{1}{\left[\beta^2 + (E_g - E_{\pm})^2\right]^{1/2}} \begin{bmatrix} -\beta \cdot \operatorname{sign}(E_g - E_{\pm}) \\ |E_g - E_{\pm}| \end{bmatrix}$$

associados
às energias $E_{\pm}$.

ALGUMAS PROPRIEDADES DE OPERADORES e EVOLUÇÃO TEMPORAL

$$S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

S_y representa um observável e portanto os seus valores próprios são reais.

$\Downarrow$

S_y é hermítica: $S_y = S_y^\dagger$

$$S_y^\dagger = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & (i)^* \\ (-i)^* & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$= S_y .$$

A matriz 2x2 hermítica mais geral que se pode escrever:

$$\mathbb{M} = a\,\sigma_x + b\,\sigma_y + c\,\sigma_z + d\,\mathbb{1}$$

com a, b, c e d reais

$$\mathbb{M} = \begin{pmatrix} 0 & a \\ a & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -ib \\ ib & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c & 0 \\ 0 & -c \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} d & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} c+d & a-ib \\ a+ib & d-c \end{pmatrix}$$

$$\mathbb{M}^\dagger = \begin{pmatrix} c+d & (a+ib)^* \\ (a-ib)^* & d-c \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} c+d & a-ib \\ a+ib & d-c \end{pmatrix} = \mathbb{M}.$$

Recordamos que

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \Rightarrow \left(|\psi\rangle = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \right)^\dagger$$

$$(|\psi\rangle)^\dagger = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix}^\dagger \Leftrightarrow \langle\psi| = [c_1^*, c_2^*]$$

O transposto conjugado do produto de matrizes

$$(\mathbb{A}\cdot\mathbb{B})^\dagger = \mathbb{B}^\dagger\cdot\mathbb{A}^\dagger$$

Se tirarmos um valor médio:

$$\big(\underbrace{\langle\psi|\mathbb{A}|\psi\rangle}_{\text{número}}\big)^\dagger = \langle\psi|\mathbb{A}^\dagger|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi|\mathbb{A}|\psi\rangle^*$$

<u>Evolução dos estados:</u>

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$$

$$\langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle =$$

$$= \langle\psi(0)|U^\dagger(t)\,\hat{A}\,U(t)|\psi(0)\rangle$$

No caso particular em $\hat{A} = \mathbb{1}$

$$\underbrace{\langle\psi(t)|\hat{\mathbb{1}}|\psi(t)\rangle}_{1} = \langle\psi(0)|U^\dagger(t)U(t)|\psi(0)\rangle$$

$$\hat{\mathbb{1}} = U^\dagger(t)U(t)$$

$$\langle\psi(0)|\psi(0)\rangle = 1$$

O inverso de $U(t)$ é $U^\dagger(t)$, ou seja,

$$U^{-1}(t) = U^\dagger(t)$$

$U(t)$ é um operador unitário. Diz-se que a evolução dos estados, para conservar a probabilidade tem que ser unitária.

$$|\psi(t)\rangle = U(t)\,|\psi(0)\rangle$$

$\langle\phi|\psi\rangle \xrightarrow[\text{evoluo}]{}$ os estados:

$$\langle\phi|\underbrace{U^\dagger(t)\,U(t)}_{\mathbb{1}}|\psi\rangle = \langle\phi(t)|\psi(t)\rangle$$

A evolução unitária preserva o produto interno dos estados.

- $U(t) = e^{-iHt/\hbar}$
- $U^\dagger(t) = e^{+iH^\dagger t/\hbar} = e^{iHt/\hbar}$

- Comutadores de operadores

$\hat{A}$ e $\hat{B}$ o comutador é =

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Exemplo: matrizes de Pauli

$$\sigma_x \sigma_y = i\sigma_z$$

$$\sigma_y \sigma_x = -i\sigma_z$$

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$$

$$\boxed{[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\,\varepsilon_{ijk}\sigma_k}$$