Aula 15 (4/Mar)

<u>Na aula de hoje:</u>

* Revisão das aulas anteriores.
* Representação de kets, bras e operadores.
* Mudança de representação.
* Auto-valores e auto-vectores de operador.
* Observáveis.

—— // ——

Revisão da aula anterior

* Bras e kets.
* Operadores e notação de Dirac.
* Representações no espaço de estados.

—— // ——

4.4 Notação de Dirac

4.4.4) Representações no espaço de estados

4.4.4.2) Representação de kets e bras

Podemos escrever um ket $|\psi\rangle$ em termos dos seus componentes numa base discreta $\{|u_i\rangle\}$ ou contínua $\{|w_\alpha\rangle\}$:

$$|\psi\rangle = \hat{1}\,|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle \underbrace{\langle u_i|\psi\rangle}_{= c_i} = \sum_i c_i\,|u_i\rangle$$

$$\Rightarrow |\psi\rangle = \begin{bmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} \longrightarrow \{|u_i\rangle\}$$

$$|\psi\rangle = \int d\alpha\, |w_\alpha\rangle \underbrace{\langle w_\alpha|\psi\rangle}_{= c(\alpha)} = \int d\alpha\; c(\alpha)\,|w_\alpha\rangle$$

$$\Rightarrow |\psi\rangle = \begin{bmatrix} \\ \langle w_\alpha|\psi\rangle \\ \\ \end{bmatrix} \; \alpha \downarrow$$

Para os bras, temos algo semelhante

$$\langle\psi| = \sum_i \underbrace{\langle\psi|u_i\rangle}_{= c_i^*}\langle u_i| \qquad\qquad \langle\psi| = \int d\alpha\, \underbrace{\langle\psi|w_\alpha\rangle}_{c^*(\alpha)}\langle w_\alpha|$$

$$= \begin{bmatrix} c_1^* & c_2^* & \cdots \end{bmatrix} \qquad\qquad = \begin{bmatrix} & c^*(\alpha) & \end{bmatrix} \;\; \xrightarrow[\alpha]{}$$

onde escolhemos representar bras como vectores linha dos coeficientes.

Assim, o produto escalar $\langle\varphi|\psi\rangle$, usando $|\psi\rangle = \sum_i \langle u_i|\psi\rangle|u_i\rangle = \sum_i c_i|u_i\rangle$ e $|\varphi\rangle = \sum_i \langle u_i|\varphi\rangle|u_i\rangle = \sum_i b_i|u_i\rangle$, temos então

$$\langle\varphi|\hat{1}|\psi\rangle = \sum_i \underbrace{\langle\varphi|u_i\rangle}_{b_i^*}\underbrace{\langle u_i|\psi\rangle}_{c_i} = \sum_i b_j^* \cdot c_i$$

$$= \begin{bmatrix} b_1^* & b_2^* & \cdots \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{bmatrix} = b_1^* c_1 + b_2^* c_2 + \cdots$$

$$= \sum_i b_i^* c_i$$

<u>Note</u>: Numa dada representação obtemos um bra $\langle\psi|$ de um ket $|\psi\rangle$ simplesmente trocamos linhas com colunas e tomamos os complexos conjugados dos coeficientes

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} c_i \end{bmatrix} \xrightarrow{+} \langle\psi| = \begin{bmatrix} c_i^* \end{bmatrix}$$

4.4.4.3) <u>Representação de operadores</u>

Para uma dada base $\{|u_i\rangle\}$ ou $\{|w_\alpha\rangle\}$, podemos escrever os elementos matriz $\hat{A}$ pelos componentes base $\{|u_i\rangle\}$ ou $\{|w_\alpha\rangle\}$ como

$$A_{ij} = \langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle \quad , \quad A(\alpha,\alpha') = \langle w_\alpha|\hat{A}|w_{\alpha'}\rangle$$

que podemos representar como matriz quadrada,

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \cdots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \cdots \\ \vdots & & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad , \text{ para base discreta}$$

$$\hat{A} = \begin{array}{cc} & \alpha' \\ \alpha & \begin{bmatrix} & & \\ \cdots & A(\alpha,\alpha') & \\ & & \end{bmatrix} \end{array} \quad , \text{ para base contínua}$$

Assim, representar o produto $\hat{A}\hat{B}$ é simples, é multiplicação de matrizes

$$(\hat{A}\hat{B})_{ij} = \langle u_i | \hat{A}\hat{B} | u_j \rangle = \langle u_i | \hat{A}\, \overset{\sum_k |u_k\rangle\langle u_k|}{\overset{\shortparallel}{\mathbb{1}}}\, \hat{B} | u_j \rangle$$

$$= \sum_k \underbrace{\langle u_i | \hat{A} | u_k \rangle}_{A_{ik}} \underbrace{\langle u_k | \hat{B} | u_j \rangle}_{B_{kj}}$$

$$= \sum_k A_{ik} B_{kj}$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} (\hat{A}\hat{B})_{ij} \end{bmatrix} = \begin{array}{c} \\ i \end{array}\begin{bmatrix} \\ A_{ik} \\ \\ \end{bmatrix} \begin{array}{c} j \\ \begin{bmatrix} & B_{kj} & \end{bmatrix} \end{array}$$

De forma semelhante, $\hat{A}$ actuando em $|\psi\rangle$,

$$|\tilde{\psi}\rangle = \hat{A}|\psi\rangle = \hat{A}\,\hat{\mathbb{1}}|\psi\rangle = \sum_k \hat{A}|u_k\rangle \underbrace{\langle u_k|\psi\rangle}_{c_k}$$

$$\Rightarrow \langle u_i|\tilde{\psi}\rangle = \sum_k \langle u_i|\hat{A}|u_k\rangle\langle u_k|\psi\rangle$$

$$\Leftrightarrow \quad \tilde{c}_i = \sum_k A_{ik}\cdot c_k$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} \\ \tilde{c}_i \\ \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & \\ & A_{ik} & \\ & & \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ c_k \\ \\ \end{bmatrix}$$

Para $\hat{A}$ actuando num bra, temos

$$\langle\tilde{\psi}|u_i\rangle = \sum_k \langle\psi|u_k\rangle\langle u_k|\hat{A}|u_i\rangle$$

$$\Leftrightarrow \tilde{c}_i^* = \sum_k c_k^*\cdot \hat{A}_{ki}$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} & \tilde{c}_i^* & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & c_k^* & \end{bmatrix}\begin{bmatrix} & & \\ & A_{ki} & \\ & & \end{bmatrix}$$

O número complexo $\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle$, com $|\psi\rangle = \sum_i c_i|u_i\rangle$ e $|\phi\rangle = \sum_i b_i|u_i\rangle$, é dado por

$$\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{1}\hat{A}\hat{1}|\psi\rangle = \sum_{ij} \underbrace{\langle\phi|u_i\rangle}_{b_i^*}\underbrace{\langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle}_{=A_{ij}}\underbrace{\langle u_j|\psi\rangle}_{c_j}$$

$$\hat{1} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|$$

$$= \sum_{ij} b_i^* A_{ij} c_j$$

$$= \begin{bmatrix} & b_i^* & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} & & \\ & A_{ij} & \\ & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ e_j \\ \\ \end{bmatrix}$$

No caso do operador $\hat{O} \equiv |\phi\rangle\langle\psi|$, os seus elementos de matriz são dados por

$$\hat{O}_{ij} = \underbrace{\langle u_i | \phi \rangle}_{b_i} \underbrace{\langle \psi | u_j \rangle}_{e_j^*} = b_i \cdot e_j^*$$

$$\Rightarrow \hat{O} = \begin{bmatrix} \\ b_i \\ \\ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} & e_j^* & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 e_1^* & b_1 e_2^* & \cdots \\ b_2 e_1^* & b_2 e_2^* & \\ b_3 e_1^* & & \ddots \\ \vdots & & \end{bmatrix}$$

Nota: Todos estes resultados são extensíveis para bases contínuas.

O hermítico conjugado de $\hat{A}$, notado $\hat{A}^+$ é dado por

$$(\hat{A}^+)_{ij} = \langle u_i | \hat{A}^+ | u_j \rangle = \langle u_j | \hat{A} | u_i \rangle^* = A_{ji}^*$$

$$\Leftrightarrow \begin{array}{c|c} & j \\ \hline i & \begin{bmatrix} & \cdots \bullet & \\ & \vdots & \end{bmatrix} \end{array} = \begin{array}{c|c} & i \\ \hline j & \begin{bmatrix} & \vdots & \\ & \bullet \cdots & \end{bmatrix}^* \end{array}$$

→ trocar linhas ↔ colunas e tomar complexo conjugado ou seja, teremos $\hat{A}^{+} = (\hat{A}^{T})^{*}$. Para bases contínuas,

$$(\hat{A}^{+})(\alpha,\alpha') = \langle \omega_{\alpha} | \hat{A}^{+} | \omega_{\alpha'} \rangle = \langle \omega_{\alpha'} | \hat{A} | \omega_{\alpha} \rangle^{*} = A(\alpha',\alpha)^{*}$$

Se $\hat{A}$ é operador hermítico, i.e. $\hat{A}^{+} = \hat{A}$, então

$$A_{ij} = (A^{+})_{ij} = A_{ji}^{*}$$

$$A(\alpha,\alpha') = (A^{+})(\alpha,\alpha') = A(\alpha',\alpha)^{*}$$

Nota: O operador hermítico será representado por matriz hermítica.

↳ elementos simétricos relativamente à diagonal são complexos conjugados.

↳ elementos diagonais são reais.

Exemplo:

$$M = \begin{bmatrix} 1 & i \\ -i & -2 \end{bmatrix} \Rightarrow M^{+} = \begin{bmatrix} 1^{*} & (-i)^{*} \\ i^{*} & (-2)^{*} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & i \\ -i & -2 \end{bmatrix} = M$$

$\Rightarrow M$ é hermítica

$$N = \begin{bmatrix} i & 1 \\ -i & 2 \end{bmatrix} \Rightarrow N^{+} = \begin{bmatrix} i^{*} & 1^{*} \\ (-i)^{*} & 2^{*} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -i & 1 \\ i & 2 \end{bmatrix} \neq N$$

$\Rightarrow N$ não é hermítica

4.4.4.4) Mudança de representação

Consideremos duas bases $\{|u_i\rangle\}$ e $\{|t_k\rangle\}$. Podemos escrever uma em função da outra usando a relação de fecho

$$|u_i\rangle = \sum_k |t_k\rangle \underbrace{\langle t_k | u_i\rangle}_{\equiv (U^\dagger)_{ki}}$$

$$|t_k\rangle = \sum_i |u_i\rangle \underbrace{\langle u_i | t_k\rangle}_{\equiv U_{ik}}$$

* Componentes dos kets

Usando definições $U_{ik} \equiv \langle u_i | t_k\rangle$ e $(U^\dagger)_{ki} \equiv \langle t_k | u_i\rangle$ $\left[\langle t_k|u_i\rangle = \langle u_i | t_k\rangle^* = (U^T_{ik})^*\right]$, então podemos escrever coeficientes do ket na nova base em termos dos da velha base

$$b_k = \langle t_k | \psi\rangle = \langle t_k | \hat{1} | \psi\rangle = \sum_i \underbrace{\langle t_k | u_i\rangle}_{(U^\dagger)_{ki}} \underbrace{\langle u_i | \psi\rangle}_{c_i}$$

$$\Longleftrightarrow b_k = \sum_i (U^\dagger)_{ki}\, c_i$$

$$\Longleftrightarrow \begin{bmatrix} \\ b_k \\ \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \\ & (U^\dagger)_{ki} & \\ \\ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ c_i \\ \\ \end{bmatrix}$$

A transformação inversa é semelhante

$$c_i = \langle u_i | \psi \rangle = \sum_k \underbrace{\langle u_i | t_k \rangle}_{U_{ik}} \underbrace{\langle t_k | \psi \rangle}_{b_k}$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} \\ c_i \\ \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & \\ & U_{ik} & \\ & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ b_k \\ \\ \end{bmatrix}$$

* Componentes dos bras

Para componentes de bra dados nas duas bases por $c_i^* = \langle \psi | u_i \rangle$ e $b_k^* = \langle \psi | t_k \rangle$, teremos

$$b_k^* = \langle \psi | t_k \rangle = \sum_i \langle \psi | u_i \rangle \langle u_i | t_k \rangle$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} & b_k^* & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & c_i^* & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} & & \\ & U_{ik} & \\ & & \end{bmatrix}$$

sendo a transf. inversa dada por

$$c_i^* = \langle \psi | u_i \rangle = \sum_k \langle \psi | t_k \rangle \langle t_k | u_i \rangle$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} & c_i^* & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & b_k^* & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} & & \\ & (U^+)_{ki} & \\ & & \end{bmatrix}$$

* Elementos matriz operador

Na base velha $A_{ij} = \langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle$ e na base nova $\tilde{A}_{kl} = \langle t_k | \hat{A} | t_l \rangle$, então

$$\tilde{A}_{kl} = \langle t_k | \overset{\mathbb{1}}{\,} A \overset{\mathbb{1}}{\,} | t_l \rangle = \sum_{ij} \langle t_k | u_i \rangle \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | t_l \rangle$$

$$\Leftrightarrow \tilde{A}_{kl} = \sum_{ij} (U^\dagger)_{ki} \cdot A_{ij} \cdot U_{jl}$$

$$\Leftrightarrow \left[\quad \tilde{A}_{kl} \quad \right] = \left[\quad (U^\dagger)_{ki} \quad \right] \left[\quad A_{ij} \quad \right] \left[\quad U_{jl} \quad \right]$$

sendo transf. inversa

$$A_{ij} = \langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle = \sum_{kl} \langle u_i | t_k \rangle \langle t_k | A | t_l \rangle \langle t_l | u_j \rangle$$

$$\Leftrightarrow A_{ij} = \sum_{kl} U_{ik} \cdot \tilde{A}_{kl} \cdot (U^\dagger)_{lj}$$

$$\Leftrightarrow \left[\quad A_{ij} \quad \right] = \left[\quad U_{ik} \quad \right] \left[\quad \tilde{A}_{kl} \quad \right] \left[\quad (U^\dagger)_{lj} \quad \right]$$

Nota: A matriz U é unitária, i.e. $UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{1}$, que assegura consistência das transf. directa e inversa.

<u>Nota</u>: Para bases contínuas temos resultados análogos.

<u>Nota</u>: Introduzimos linguagem matricial para tratar problemas de M. Quântica — "Matrix Mechanics".

4.5) <u>Observáveis</u>

Observáveis são "objectos" centrais em M. Quântica.

4.5.1) <u>Auto-valores e auto-vectores de um operador</u>

Vimos já que eq. de auto-valores e auto-vectores é dada por

$$\hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle,$$

e ao conjunto dos α's vamos chamar espectro do operador $\hat{A}$.

Nota: Se $|\psi\rangle$ é auto-vector de $\hat{A}$, $|\phi\rangle = \alpha|\psi\rangle$ é tb auto-vector de $\hat{A}$. Para evitar esta ambiguidade vamos trabalhar sempre com $\langle\psi|\psi\rangle 1$, i.e $|\psi\rangle$ normalizados.

Nota: Quando tivermos conjunto $\{|\psi_n^i\rangle\}$ $i = 1, \dots, g_n$, linearmente independentes, tendo todos eles o mesmo auto-valor a_n, então dizemos que auto-valor a_n é degenerado com degenerescência g_n.

Como determinar auto-valores e auto-vectores na prática?

↳ Escolhemos repres. $\{|u_i\rangle\}$ e assumimos $\mathcal{E}$ tem dimensão finita N. Então

$$\langle u_i|\hat{A}\overset{\hat{1}}{|}\psi\rangle = \alpha\langle u_i|\psi\rangle$$

$$\Leftrightarrow \sum_j \langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle = \alpha\langle u_i|\psi\rangle$$

$$\Leftrightarrow \sum_j A_{ij} e_j = \lambda e_i$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} & & \\ & A_{ij} & \\ & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ e_j \\ \\ \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \\ e_i \\ \\ \end{bmatrix}$$

onde λ, e_i (e_j) são incógnitas. Podemos escrever

$$\sum_j \left[A_{ij} - \lambda \delta_{ij} \right] e_j = 0$$

que é sist. eqçs lineares homogéneo, logo tem solução se

$$\det \left[A_{ij} - \lambda \delta_{ij} \right] = 0$$

que é chamada eqç caracteristica. Em linguagem matricial

$$\det \left[\begin{bmatrix} & & \\ & A_{ij} - \lambda \delta_{ij} & \\ & & \end{bmatrix} \right] = 0 \Leftrightarrow \begin{vmatrix} A_{11} - \lambda & A_{12} & \\ A_{21} & A_{22} - \lambda & \\ \vdots & & \ddots \end{vmatrix} = 0 \quad (*)$$

que é eqç ordem N em λ que terá N soluções (reais ou complexas), que podem ser repetidas.

↳ estas soluções serão os auto-valores.

Para obter os auto-vectores $|\psi\rangle$ associados a um dado auto-valor λ_0, temos resolver o sist eqçs substituindo $\lambda \rightarrow \lambda_0$.

↳ N eqçs, mas apenas N-1 independentes, tendo N incógnitas, c_i's.

↳ Teremos que usar $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, para termos N eqçs indep para N incógnitas.

<u>Nota:</u> Se λ_0 simples da eqç (*) então teremos um auto-vector para λ_0. Mas se λ_0 for raiz múltipla de ordem $q > 1$, teremos duas possibilidades:

↳ N-1 eqçs indeps. ⇒ teremos apenas 1 auto-vector para este λ_0 ⇒ $\hat{A}$ <u>não é diagonalizável</u>

↳ $AU = UD$, U é singular logo não há U^{-1} ⇒ $\cancel{D = U^{-1}AU}$.

↳ $N-p$ eq's indep. $\Rightarrow$ teremos p auto-vectores distintos correspondendo a λ_0 e $\hat{A}$ será diagonalizável se $p=q$.

Nota: Queremos mudar de base e diagonalizar a matriz, para podermos fazer decomposição espectral e saber resultados (e probabilidades) de uma medição associada a um dado operador.