Aula 14 (2/Mar)

Na aula de hoje:

* Revisão das aulas anteriores.
* Bras e Kets.
* Operadores e notação de Dirac.
* Representações no espaço de estados.

Revisão da aula anterior

* "Bases" contínuas "ortonormais" de $\mathcal{F}$
* Operadores lineares em $\mathcal{F}$
* Notação de Dirac, espaço de estados $\mathcal{E}$ e vectores "ket".

4.4 Notação de Dirac

4.4.2) Vectores "ket" e vectores "bra"

4.4.2.2) Vectores "bra"

Consideremos um funcional linear, χ,

$$\chi(\ ) : \mathcal{E} \longrightarrow \mathbb{C}$$
$$|\phi\rangle \longrightarrow \chi(|\phi\rangle)$$

que respeita $\chi(\lambda_1|\phi_1\rangle + \lambda_2|\phi_2\rangle) = \lambda_1 \chi(|\phi_1\rangle) + \lambda_2 \chi(|\phi_2\rangle)$
ou seja é linear.

Podemos mostrar que o conjunto de todos os funcionais lineares a actuar nos kets $|\phi\rangle \in \mathcal{E}$, formam também espaço vectorial.

↳ Vamos chamar esse espaço vectorial de espaço dual de $\mathcal{E}$, e vamos notá-lo por $\mathcal{E}^*$.

Aos elementos de $\mathcal{E}^*$ vamos chamar "bra" e usaremos notação $\langle\ |$, por exemplo,

$$\langle \chi |$$

Assim, o funcional $\chi(\cdots)$ será notado $\langle \chi |$ e a sua actuação no ket $|\phi\rangle$

será

$$\chi(|\phi\rangle) = \langle \chi | \phi \rangle$$

↳ bra + ket = braket
(inglês "parêntises")

4.4.2.3) Correspondência entre kets e bras

Como existe produto escalar em $\mathcal{E}$, que associa dois kets de $\mathcal{E}$ a um número complexo, ele é funcional

$$(\ , \ ) : \mathcal{E} \times \mathcal{E} \longrightarrow \mathbb{C}$$
$$|\phi\rangle, |\psi\rangle \longrightarrow (|\phi\rangle, |\psi\rangle)$$

obedece às propriedades seção 4.1.2).

Isto permite-nos associar a todo e qualquer ket de $\mathcal{E}$, $|\phi\rangle$, um bra $\langle\phi|$ de $\mathcal{E}^*$,

$$\langle \phi | \equiv (|\phi\rangle, \ldots)$$

e assim podemos notar produto escalar por

$$(|\phi\rangle, |\psi\rangle) = \langle \phi | \psi \rangle$$

Nota: A correspondência ket $\longrightarrow$ bra, i.e.

$$\mathcal{E} \longrightarrow \mathcal{E}^*$$
$$|\phi\rangle \longrightarrow \langle\phi| \equiv (|\phi\rangle, \ldots)$$

é anti-linear, pois produto escalar é anti-linear no primeiro argumento, i.e.

$$\begin{aligned}(\lambda_1|\phi_1\rangle + \lambda_2|\phi_2\rangle, |\psi\rangle) &= \lambda_1^*(|\phi_1\rangle, |\psi\rangle) + \lambda_2^*(|\phi_2\rangle, |\psi\rangle) \\ &= \lambda_1^*\langle\phi_1|\psi\rangle + \lambda_2^*\langle\phi_2|\psi\rangle \\ &= (\lambda_1^*\langle\phi_1| + \lambda_2^*\langle\phi_2|)|\psi\rangle\end{aligned}$$

assim

$$\lambda_1|\phi_1\rangle + \lambda_2|\phi_2\rangle \longrightarrow \lambda_1^*\langle\phi_1| + \lambda_2^*\langle\phi_2|.$$

Nota: Por vezes usaremos $|\lambda\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle$ e $\langle\lambda\phi| = \lambda^*\langle\phi|$.

Nota: As propriedades do produto escalar ficarão então:

- $\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*$
- $\langle\phi|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1\langle\phi|\psi_1\rangle + \lambda_2\langle\phi|\psi_2\rangle$
- $\langle\lambda_1\phi_1 + \lambda_2\phi_2|\psi\rangle = \lambda_1^*\langle\phi_1|\psi\rangle + \lambda_2^*\langle\phi_2|\psi\rangle$
- $\langle\psi|\psi\rangle$ é real, positivo (ou zero se $|\psi\rangle = 0$)

Nota: Apesar de todo o Ket ter bra correspondente, o contrário não é em geral verdadeiro.

↳ Ex: F. onda delta Dirac, $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \notin \mathcal{F}$, logo $|\xi_{\vec{r}_0}\rangle \notin \mathcal{E}$, mas o produto escalar $(\xi_{\vec{r}_0}, \psi)$ está bem definido, logo $\langle \xi_{\vec{r}_0}| \equiv (\xi_{\vec{r}_0}, \cdots)$ existe em $\mathcal{E}^*$.

4.4.3) Operadores lineares

Podemos reescrever resultados de 4.3, usando notação Dirac.

Um operador linear é endomorfismo

$$\hat{A} : \mathcal{E} \longrightarrow \mathcal{E}$$
$$|\psi\rangle \longrightarrow |\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle ,$$

que é linear, i.e.

$$\hat{A}(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1\hat{A}|\psi_1\rangle + \lambda_2\hat{A}|\psi_2\rangle .$$

O produto operadores $\hat{A}\hat{B} \equiv \hat{C}$

$$\hat{C}|\psi\rangle = \hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{A}\left(\hat{B}|\psi\rangle\right) = \hat{A}|\chi\rangle = |\phi\rangle,$$

sendo o comutador $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$.

Ao produto escalar entre $|\phi\rangle$ e $|\chi\rangle \equiv \hat{B}|\psi\rangle$ chamamos elemento de matriz de $\hat{B}$,

$$\langle\phi|\hat{B}|\psi\rangle = \text{número complexo}$$

Nota: Temos que $\langle\phi|\left(\hat{B}|\psi\rangle\right) = \left(\langle\phi|\hat{B}\right)|\psi\rangle$ é o mesmo elemento de matriz.

Nota: Um caso específico de operador é $|\phi\rangle\langle\psi|$, bra e ket com "ordem trocada",

$$|\phi\rangle\langle\psi| : \mathcal{E} \longrightarrow \mathcal{E}$$

$$|\chi\rangle \longrightarrow |\phi\rangle\underbrace{\langle\psi|\chi\rangle}_{b \,\to\, \text{nº complexo}} = b|\phi\rangle = |\tilde{\phi}\rangle$$

Nota: Atenção à ordem de bras e kets

$$\langle\phi|\psi\rangle = \text{número}$$

$$|\psi\rangle\langle\phi| = \text{operador}$$

<u>Nota</u>: Nesta notação ordem dos símbolos é importante (excepto para números)

$$\begin{cases} \alpha|\phi\rangle = |\phi\rangle.\alpha \\ \alpha\langle\phi| = \langle\phi|.\alpha \\ \hat{A}\,\alpha|\phi\rangle = \alpha\hat{A}|\phi\rangle = \hat{A}|\phi\rangle\alpha \\ \langle\phi|\alpha|\psi\rangle = \alpha\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle.\alpha \end{cases} \quad , \alpha \text{ número}$$

mas em geral para outros "objectos"

$$\begin{cases} \hat{A}|\psi\rangle \neq |\psi\rangle\hat{A} \\ \hat{A}\langle\psi| \neq \langle\psi|\hat{A} \\ \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle \neq \hat{A}\langle\phi|\psi\rangle \end{cases} \quad , \hat{A} \text{ é operador}$$

Repare, no entanto, que

$$|x\rangle\underbrace{\langle\phi|\psi\rangle}_{\text{número}} = \langle\phi|\psi\rangle|x\rangle$$

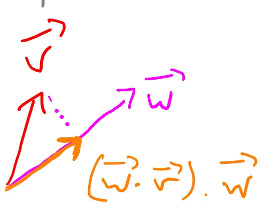
<u>Nota</u>: Operador de projecção em $|\psi\rangle$, notado $\hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$,

$$|\psi\rangle\langle\psi| : \mathcal{E} \longrightarrow \mathcal{E}$$

$$|x\rangle \longrightarrow |\psi\rangle\underbrace{\langle\psi|x\rangle}_{\equiv a}$$

$$= a|\psi\rangle$$

Análogo a projecção em 2D:



Propriedades

$$* \quad \hat{P}_\psi|\phi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = a|\psi\rangle$$

$$* \quad \hat{P}_\psi|\psi\rangle = |\psi\rangle\overbrace{\langle\psi|\psi\rangle}^{=1} = |\psi\rangle$$

$$* \quad \hat{P}_\psi^2|\phi\rangle = \hat{P}_\psi|\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = |\psi\rangle\underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{=1}\langle\psi|\phi\rangle$$

$$= |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = \hat{P}_\psi|\phi\rangle$$

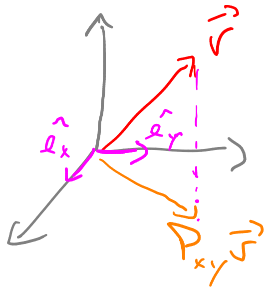
$$\Longleftrightarrow \boxed{\hat{P}_\psi^2 = \hat{P}_\psi}$$

Nota: Operador projeção num subespaço $\mathcal{E}_q$ de estados ortonormais $|\varphi_i\rangle$, $i=1,\dots,q$, $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$, é dado por

$$\hat{P}_q = \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \, ,$$

que é fácil mostrar $\hat{P}_q^2 = \hat{P}_q$.

Análogo à projecção de vector em 3D num plano, ex. plano xy.



$$P_{xy}\vec{v} = (\hat{e}_x\cdot\vec{v})\,\hat{e}_x + (\hat{e}_y\cdot\vec{v})\,\hat{e}_y$$
$$= v_x\,\hat{e}_x + v_y\,\hat{e}_y$$

4.4.3.1) Operador hermítico conjugado

Tb chamado de operador adjunto e notado

por $\hat{A}^\dagger$ ("dagger"), é definido invocando existência de bra para cada ket

$$|\psi\rangle \longrightarrow \langle\psi|$$

dizendo que o bra correspondente ao ket $\hat{A}|\psi\rangle = |\chi\rangle$ é o bra $\langle\chi| \equiv \langle\psi|\hat{A}^\dagger$, i.e.

$$|\chi\rangle \equiv \hat{A}|\psi\rangle \longrightarrow \langle\chi| \equiv \langle\psi|\hat{A}^\dagger$$

Nota: A actuação de $\hat{A}^\dagger$ nos bras é linear, i.e.

$$(\alpha_1\langle\phi_1| + \alpha_2\langle\phi_2|)\hat{A}^\dagger = \alpha_1\langle\phi_1|\hat{A}^\dagger + \alpha_2\langle\phi_2|\hat{A}^\dagger$$

que podemos mostrar lembrando 4.4.2.3),

$$\alpha_1^*|\phi_1\rangle + \alpha_2^*|\phi_2\rangle \longrightarrow \alpha_1\langle\phi_1| + \alpha_2\langle\phi_2| .$$

Assim,

$$\hat{A}(\alpha_1^*|\phi_1\rangle + \alpha_2^*|\phi_2\rangle) = \alpha_1^*\hat{A}|\phi_1\rangle + \alpha_2^*\hat{A}|\phi_2\rangle$$

$\downarrow$ corresp ket $\rightarrow$ bra $\qquad\qquad \downarrow$ corresp.

$$(\alpha_1\langle\phi_1| + \alpha_2\langle\phi_2|)\hat{A}^\dagger = \alpha_1\langle\phi_1|\hat{A}^\dagger + \alpha_2\langle\phi_2|\hat{A}^\dagger$$

$\square$

<u>Nota</u>: Operador $\hat{A}$ tb <u>actua linearmente nos bras</u>.

Como temos que $(\langle \chi | \hat{A}) | \psi \rangle = \langle \chi | (\hat{A} | \psi \rangle)$ e se $\langle \chi | \equiv \lambda_1 \langle \phi_1 | + \lambda_2 \langle \phi_2 |$, então

$$\langle \chi | (\hat{A} | \psi \rangle) = \lambda_1 (\langle \phi_1 | \hat{A}) | \psi \rangle + \lambda_2 (\langle \phi_2 | \hat{A}) | \psi \rangle$$
$$= \left[(\lambda_1 \langle \phi_1 | + \lambda_2 \langle \phi_2 |) \hat{A} \right] | \psi \rangle .$$

$\square$

<u>Nota</u>: Das propriedades do producto escalar $(\chi, \psi) = (\psi, \chi)^*$, que em notação Dirac fica

$$\langle \chi | \psi \rangle = \langle \psi | \chi \rangle^* .$$

<u>Se</u> $| \chi \rangle \equiv \hat{A} | \phi \rangle \longrightarrow \langle \chi | \equiv \langle \phi | \hat{A}^+$, então

$$\boxed{\langle \phi | \hat{A}^+ | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle^*}$$

que resulta em

$\hookrightarrow (\hat{A}^{+})^{+} = \hat{A}$

$\hookrightarrow (\lambda\hat{A})^{+} = \lambda^{*}\hat{A}^{+}$

$\hookrightarrow (\hat{A}+\hat{B})^{+} = \hat{A}^{+} + \hat{B}^{+}$

$\hookrightarrow (\hat{A}\hat{B})^{+} = \hat{B}^{+}\hat{A}^{+}$

$\hookrightarrow (\hat{A}\hat{B})|\psi\rangle \longrightarrow \langle\psi|(\hat{A}\hat{B})^{+}$

$\hat{A}(\underbrace{\hat{B}|\psi\rangle}_{|x\rangle}) \longrightarrow (\underbrace{\langle\psi|\hat{B}^{+}}_{\langle x|}).\hat{A}^{+}$

4.4.3.2) Operador hermítico

Nesta notação, um operador hermítico, i.e. $(\psi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\psi, \psi)$ $\forall\psi$, pode ser escrito como

$\langle\psi|(\hat{A}|\psi\rangle)$ $\hookrightarrow (\langle\psi|\hat{A}^{+})|\psi\rangle$

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

$$\Rightarrow \boxed{\hat{A} = \hat{A}^{+}}$$

Nota: O produto de dois operadores hermíticos $\hat{A}^+ = \hat{A}$ e $\hat{B}^+ = \hat{B}$ só é hermítico se o seu comutador for zero.

Podemos demonstrar este resultado admitindo por hipótese que o operador $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$ é hermítico, i.e. $\hat{C}^+ = \hat{C}$. Assim teremos que ter

$$(\hat{A}.\hat{B})^+ \overset{\text{hipótese}}{=} \hat{A}\hat{B} \Longleftrightarrow \hat{B}^+\hat{A}^+ = \hat{A}.\hat{B}$$
$$\Longleftrightarrow \hat{B}.\hat{A} = \hat{A}\hat{B}$$
$$\Longleftrightarrow \hat{A}.\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$$
$$\Longleftrightarrow [\hat{A},\hat{B}] = 0 \quad \square$$

4.4.3.3) Operação de conjugação hermítica

Tb chamada operação adjunta, transforma "objectos" nos seus hermíticos conjugados.

Notemos esta operação com o

"dagger" $\dagger$ seguindo notação da seção 4.4.3.1).

O ket $|\psi\rangle$ e seu bra $\langle\psi|$ são ditos hermíticos conjugados um do outro, i.e.

$$|\psi\rangle^\dagger = \langle\psi| \quad ,$$

$$\langle\psi|^\dagger = |\psi\rangle \quad .$$

Quando temos $(|a\rangle\langle b|)^\dagger$, o que acontece?

$$\langle\psi|\overbrace{(|a\rangle\langle b|)^\dagger}^{\hat{O}^\dagger}|\phi\rangle = \langle\phi|\overbrace{(|a\rangle\langle b|)}^{\hat{O}}|\psi\rangle^*$$

$$= \langle\phi|a\rangle^*\langle b|\psi\rangle^*$$

$$= \langle a|\phi\rangle\langle\psi|b\rangle$$

$$= \langle\psi|b\rangle\langle a|\phi\rangle$$

e assim temos

$$(|a\rangle\langle b|)^\dagger = |b\rangle\langle a|$$

Ou seja, a conjungação hermítica transforma kets em bras e vice-versa, troca a ordem de operadores, e transforma escalares nos seus complexos conjugados. Em resumo:

(i) Substituir
- constantes por suas complexas conj.
- kets pelos bras e vice-versa
- operadores pelos herm. conjug

(ii) Inverter ordem dos factores.

Exemplo:

$$\left[\langle\psi|AB|a\rangle\langle b|\phi\rangle\lambda\right]^{\dagger} = \lambda^{*}\langle\phi|b\rangle\langle a|B^{\dagger}A^{\dagger}|\psi\rangle$$

4.4.4) Representações no espaço de estados $\mathcal{E}$

Em 4.3.4) discutimos que podemos escolher diferentes bases para representar um mesmo sistema quântico, i.e. podemos escolher diferentes representações do sistema quântico.

↳ Análogo ao que fazemos em espaço vectorial 2D ou 3D trocando sistema coordenadas.

No que se segue vamos escrever as relações definidoras de uma base ortonormal [que vimos em 4.2], agora usando notação de Dirac.

Depois veremos como podemos representar kets, bras, operadores e sua actuação em kets e bras. Veremos ainda como poderemos mudar de uma representação do problema quântico para outra.

4.4.4.1) Relações características de base ortonormal na notação Dirac.

Consideremos base discreta $\{|u_i\rangle\}$ ou contínua $\{|w_\alpha\rangle\}$, tal que

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i \, |u_i\rangle$$

$$|\psi\rangle = \int d\alpha \; c(\alpha) \, |w_\alpha\rangle$$

As relações de ortonormalização e de Fecho podem ser escritas como

* <u>Ortonormalização</u>

$$\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}$$

$$\langle w_\alpha | w_{\alpha'} \rangle = \delta(\alpha - \alpha')$$

* <u>Relação de Fecho</u>

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

$$\int d\alpha \, | w_\alpha \rangle \langle w_\alpha | = \hat{\mathbb{1}} ,$$

onde $\hat{\mathbb{1}}$ é o operador identidade no espaço $\mathcal{E}$.

Podemos demonstrar estas duas relações de fecho da seguinte forma:

↳ <u>Base discreta</u>

$$c_i = \langle u_i | \psi \rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle = \sum_i \langle u_i | \psi \rangle |u_i\rangle$$

$$= \underbrace{\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|}_{\mathbb{1}} \psi\rangle = |\psi\rangle$$

↳ Base contínua

$$c(\alpha) = \langle \omega_\alpha | \psi \rangle$$

$$|\psi\rangle = \int d\alpha\, c(\alpha) |\omega_\alpha\rangle = \int d\alpha \langle \omega_\alpha | \psi \rangle |\omega_\alpha\rangle$$

$$= \underbrace{\int d\alpha\, |\omega_\alpha\rangle\langle \omega_\alpha|}_{\hat{\mathbb{1}}} \psi\rangle = |\psi\rangle$$

Podemos resumir todas as relações que vimos em 4.2 para bases discretas e contínuas, na tabela seguinte:

	Base discreta $\{\lvert u_n\rangle\}$	Base contínua $\{\lvert u_\alpha\rangle\}$
Expansão da Função de Onda	$\lvert\Psi\rangle = \sum_n c_n \lvert u_n\rangle$	$\lvert\Psi\rangle = \int d\alpha c(\alpha) \lvert u_\alpha\rangle$
Relação de Ortonormalização	$\langle u_n \lvert u_m\rangle = \delta_{nm}$	$\langle u_\alpha \lvert u_{\alpha'}\rangle = \delta(\alpha - \alpha')$
Projecção da Função de Onda	$\langle u_n \lvert \Psi\rangle = c_n$	$\langle u_\alpha \lvert \Psi\rangle = c(\alpha)$
Produto escalar em componentes	$\langle \Phi \lvert \Psi\rangle = \sum_n b_n^* c_n$	$\langle \Phi \lvert \Psi\rangle = \int d\alpha b^*(\alpha) c(\alpha)$
Relação de Fecho	$\hat{P}^{(n)} \equiv \sum_n \lvert u_n\rangle\langle u_n\rvert = \hat{\mathbf{1}}$	$\hat{P}^{(\alpha)} \equiv \int d\alpha \lvert u_\alpha\rangle\langle u_\alpha\rvert = \hat{\mathbf{1}}$