Formalismo matemático da mecânica quântica.

Refs.: Cap. 7. Messiah
Caps. 9 e 10. Merzbacher

ideia: introduzir a formulação axiomática da M.Q.

inicial: discussão espaço vetorial via uma notação usual.

· Vetores I.

Lembrar: estado do sistema descrito vetor ψ;
$\psi \in$ espaço vetorial (complexo) abstrato

considerar: ψ_a, ψ_b e ψ_c $\in$ espaço vetorial abstrato $\mathcal{E}$

· propriedades espaço vetorial:

- $\psi_a + \psi_b = \psi_b + \psi_a$ (comutativa)
- $\psi_a + (\psi_b + \psi_c) = (\psi_a + \psi_b) + \psi_c$ (associativa)

$$
\begin{aligned}
&- (\lambda+\mu)\psi_a = \lambda\psi_a + \mu\psi_a \\
&\mu(\lambda\psi_a) = (\mu\lambda)\psi_a \qquad ; \quad \lambda, \mu \in \mathbb{C} \\
&\lambda(\psi_a+\psi_b) = \lambda\psi_a + \lambda\psi_b \\
&1 \cdot \psi_a = \psi_a
\end{aligned}
\tag{1.1}
$$

- $\psi + 0 = \psi$: $\exists$ vetor nulo 0
  $0 \cdot \psi = 0$
  ↳ número

como $\psi_c = \lambda\psi_a + \mu\psi_b \in \mathcal{E}$ p/ $\forall\ \psi_a, \psi_b \in \mathcal{E}$. e $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$

↳ $\mathcal{E}$: espaço vetorial linear. (1.2) considerar: conjunto $\underline{n}$ vetores $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n \in$ espaço vetorial

se a única solução da equação:

$\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 + \ldots + \lambda_n \psi_n = 0$ é a solução trivial

$\lambda_1 = \lambda_2 = \ldots = \lambda_n = 0 \rightarrow \psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n$: conjunto vetores linearmente independentes.

se o número máximo de vetores linearmente independentes = $\underline{n}$

↳ $\dim \mathcal{E} = n$: dimensão espaço vetorial $\mathcal{E}$

· conjunto de vetores linearmente independentes constituem uma base p/ o espaço vetorial

ou $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n$ é um conjunto completo de vetores

↳ $\forall\ \psi \in \mathcal{E}$ = combinação linear vetores da base:

componentes vetor ψ

$$\psi = \sum_{i=1}^{n} a_i \psi_i \quad ; \quad a_i \in \mathbb{C} \tag{2.1}$$

Obs.: análogo geométrico: $\vec{u} = u_x \hat{x} + u_y \hat{y} + u_z \hat{z}$

$\{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}\}$: base

· Definição: (ψ_a, ψ_b) : produto escalar entre vetores ψ_a e ψ_b

notar: ψ_a : pré-fator

ψ_b : pós-fator

· propriedades produto escalar:

(1) $(\psi_a, \psi_b) = (\psi_b, \psi_a)^*$

(2) $(\psi_a, \lambda\psi_b) = \lambda(\psi_a, \psi_b)$; $\lambda \in \mathbb{C}$ (3.1)

(3) $(\psi_a, \psi_b + \psi_c) = (\psi_a, \psi_b) + (\psi_a, \psi_c)$

(4) $(\psi_a, \psi_a) \geq 0$ (igualdade $\rightarrow \psi_a =$ vetor nulo)

notar: (1) + (2) $\rightarrow$ $(\lambda\psi_a, \psi_b) = \lambda^*(\psi_a, \psi_b)$: produto escalar é <u>antilinear w.r.t. pré-fator</u>!

- Definições: - $\sqrt{(\psi,\psi)} = \|\psi\|$: norma ou comprimento ψ

↳ se $(\psi,\psi) = 1$ $\rightarrow$ ψ : <u>vetor normalizado</u>

- se $(\psi_a, \psi_b) = 0$ $\rightarrow$ ψ_a e ψ_b são vetores <u>ortogonais</u>

- se $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n$ são linearmente independentes e

$$(\psi_i, \psi_j) = \delta_{ij} \tag{3.2}$$

↳ $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n$: base <u>ortonormal</u>

notar: Eqs. (2.1) e (3.2),

$$(\psi_j, \psi) = \sum_{i=1}^{n} a_i \underbrace{(\psi_j, \psi_i)}_{\delta_{ij}} = a_j \text{ : componente } \psi \tag{3.4}$$

· se $\psi_a = \sum_{i=1}^{n} a_i\psi_i$ e $\psi_b = \sum_{j=1}^{n} b_j\psi_j$; $a_i, b_j \in \mathbb{C}$

↳ $$(\psi_a, \psi_b) = \left(\sum_{i=1}^{n} a_i\psi_i \,,\, \sum_{j=1}^{n} b_j\psi_j\right)$$

$$= \sum_{ij} a_i^* b_j (\psi_i, \psi_j) = \sum_i a_i^* b_i \tag{3.5}$$

Eq. (3.5) : produto escalar entre ψ_a e ψ_b em termos de suas componentes na base $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n$.

caso particular (3.5) : $(\psi_a, \psi_a) = \sum_{i=1}^{n} |a_i|^2$ (3.6)

· Definição: espaço de Hilbert,

o espaço vetorial $\mathcal{E}$ é um espaço de Hilbert se:

(i) $\mathcal{E}$: espaço vetorial linear : Eq. (1.2)

(ii) É possível definir um produto escalar que satisfaz propriedades (3.1)

(iii) $\mathcal{E}$: espaço vetorial completo

Lembrar: uma sequência de Cauchy ψ_n é tal que

$\lim_{n,m \to +\infty} \| \psi_n - \psi_m \| = 0$: critério de convergência

se $\mathcal{E}$ espaço vetorial completo → cada sequência de Cauchy $\psi_n \in \mathcal{E}$ converge p/ $\psi \in \mathcal{E}$, i.e.,

$$\lim_{n \to +\infty} \| \psi_n - \psi \| = 0$$

(iv) $\mathcal{E}$: espaço vetorial separável

$\exists$ uma sequência de Cauchy $\psi_n \in \mathcal{E}$ tal que p/ cada $\psi \in \mathcal{E}$ e $\epsilon > 0$, $\exists$ pelo menos um elemento da sequência que satisfaz

$$\| \psi_n - \psi \| < \epsilon$$

· a dimensão N do espaço de Hilbert pode ser finita ou infinita enumerável ;

no segundo caso temos, por exemplo,

$$\psi_a = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \psi_i \in \mathcal{E} \, , \quad a_i \in \mathbb{C} \quad e$$

$\psi_1, \psi_2, \ldots$: base ortonormal espaço $\mathcal{E}$

↳ $$(\psi_a, \psi_a) = \sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2 \qquad (3.7)$$

hipótese : série (3.7) é convergente, i.e.,

$$\sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2 < +\infty$$

↳ espaços vetoriais $\dim N < +\infty$ e $\dim N \to +\infty$ (enumerável) podem ser tratados forma similar (~ separabilidade)

Obs. : o caso $\dim N \to \infty$ e inumerável (espaços contínuos) será discutido a posteriori.

/ /

· Operadores I.

Definição operador: mapeamento do espaço vetorial no próprio espaço vetorial;

em detalhes, se ψ e ψ' $\in$ espaço vetorial $\mathcal{E}$

↳ operador A é tal que $\psi' = A(\psi)$: ψ' é função ψ

· caso particular: operador linear.

propriedades: $A(\psi_a + \psi_b) = A(\psi_a) + A(\psi_b)$

$$A(\lambda\psi_c) = \lambda A(\psi_c) \quad ; \quad \lambda \in \mathbb{C} \qquad (4.1)$$

↳ podemos escrever: $\psi' = A(\psi) \rightarrow \psi' = A\psi$

· igualdade entre operadores:

se $A\psi = B\psi$ p/ $\forall \psi \in \mathcal{E} \rightarrow A = B$

· operações: $(A+B)\psi = A\psi + B\psi$ (4.2)

$(AB)\psi = A(B\psi)$

Obs.: em geral, $AB \neq BA$: operadores A e B não comutam

Ex. 1: op. identidade $\mathbb{1}$.

p/ $\forall \psi \in \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{1}\psi = \psi$

/ /

Ex. 2 : projetor P_a,

se $(\psi_a, \psi_a) = 1$, podemos relacionar 2 vetores ψ e ψ':

$$\psi' = \psi_a(\psi_a, \psi) \equiv P_a \psi \qquad (5.1)$$

pois relação entre ψ e ψ' é linear.

· propriedades:

- $P_a \psi_a = \psi_a$ (5.2)
- $P_a^2 = P_a$
- $P_i P_j = P_j P_i = 0$ p/ $P_i \psi = \psi_i(\psi_i, \psi)$; $\psi_i, \psi_j \in$ base de $\mathcal{E}$
  $P_j \psi = \psi_j(\psi_j, \psi)$
- $\sum_{i=1}^{n} P_i = 1$

vamos verificar as propriedades acima,

· $P_a \psi_a = \psi_a(\psi_a, \psi_a) = \psi_a$

· $P_a^2 \psi = P_a(P_a \psi) = P_a\big(\psi_a(\psi_a, \psi)\big) = (\psi_a, \psi) P_a \psi_a$

$= \psi_a(\psi_a, \psi) = P_a \psi$;

como ψ é arbitrário $\rightarrow P_a^2 = P_a$

· $P_i P_j \psi = P_i\big(\psi_j(\psi_j, \psi)\big) = (\psi_j, \psi) P_i \psi_j = (\psi_j, \psi)\psi_i(\psi_i, \psi_j) = 0$,
p/ $i \neq j$

de modo análogo $\rightarrow P_j P_i \psi = 0$

· $\sum_{i=1}^{n} P_i \psi = \sum_i \psi_i(\psi_i, \psi) = \sum_i a_i \psi_i = \psi \rightarrow \sum_{i=1}^{n} P_i = 1$.

Eq. (3.4)

· considerar base ortonormal $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n$ e op. linear A.

como $A\psi_j \in$ espaço vetorial, podemos escrever

$$A\psi_j = \sum_{i=1}^{n} \psi_i A_{ij} \quad ; \quad j = 1, 2, \ldots, n \text{ e } A_{ij} \in \mathbb{C} \qquad (6.1)$$

se $\psi_a = \sum_{j=1}^{n} a_j \psi_j$ e $\psi_b = \sum_i b_i \psi_i$ são tais que $\psi_b = A\psi_a$

$$\hookrightarrow \sum_i b_i \psi_i = \sum_j a_j A\psi_j = \sum_i \sum_j \psi_i A_{ij} a_j$$

$$\hookrightarrow b_i = \sum_{j=1}^{n} A_{ij} a_j \qquad (6.2)$$

Eq. (6.2) : o efeito do operador A sob ψ_a é determinado pelo conjunto de n^2 A_{ij}.

podemos escrever Eq. (6.2) em forma matricial :

$$\underbrace{\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}}_{\substack{\text{representação} \\ \text{vetor } \psi_b \text{ na} \\ \text{base } \psi_i}} = \underbrace{\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & & & \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}}_{\substack{\text{representação} \\ \text{operador } A \\ \text{na base } \psi_i}} \underbrace{\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}}_{\substack{\text{representação} \\ \text{vetor } \psi_a \text{ na} \\ \text{base } \psi_i}} \qquad (6.3)$$

notar Eq. (6.1) :

$$(\psi_i, A\psi_j) = \sum_{k=1}^{n} (\psi_i, \psi_k) A_{kj} = A_{ij}$$

$$\hookrightarrow A_{ij} = (\psi_i, A\psi_j) \qquad (6.4)$$

Ex.: projetor P_a, Eq. (5.1),

se $\psi_a = \sum_k a_k \psi_k$

↳ $(P_a)_{ij} = (\psi_i, P_a \psi_j) = (\psi_i, \psi_a(\psi_a, \psi_j))$

$$= (\psi_a, \psi_j)(\psi_i, \psi_a) = a_j^* a_i \qquad (7.1)$$

Exercício: considerar operadores A e B e mostrar que

$$\cdot\ (A+B)_{ij} = A_{ij} + B_{ij}$$
$$\qquad (7.2)$$
$$\cdot\ (AB)_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj}$$

Obs.: notar a notação: operador A ⟷ matriz A associada à representação do op. A na base ψ_i!

· Definição: o operador adjunto (hermitiano conjugado) A^+ do op. A é tal que p/ ψ e $\psi' \in \mathcal{E}$

$$(\psi, A^+\psi') = (A\psi, \psi'). \qquad (7.3)$$

notar:

$$(\psi, A\psi') \underset{\text{Eq. (3.1)}}{=} (A\psi', \psi)^* \underset{\text{Eq. (7.3)}}{=} (\psi', A^+\psi)^* = (A^+\psi, \psi'),$$

i.e., o op. adjunto permite alterar a posição do op. A no produto escalar!

Eq. (7.3) p/ $\psi = \psi_i$ e $\psi' = \psi_j$:

$$A^{+}_{ij} = (\psi_i, A^{+}\psi_j) = (A\psi_i, \psi_j) = (\psi_j, A\psi_i)^* = A^*_{ji} = (A^t)^*_{ij}$$

ou, em notação matricial : $A^+ = (A^t)^*$ (8.1)

Exercício: mostrar que (propriedades) :

- $(AB)^+ = B^+A^+$
- $(A^+)^+ = A$
- $(\alpha A)^+ = \alpha^* A^+$
- $(A+B)^+ = A^+ + B^+$ (8.2)

A.: p/ $\forall$ ψ e $\psi' \in \mathcal{E}$: $(\psi, (AB)^+\psi') = (AB\psi, \psi') =$

$$= (B\psi, A^+\psi') = (\psi, B^+A^+\psi') \rightarrow (AB)^+ = B^+A^+$$

- se $A^+ = A$ → operador A é <u>autoadjunto</u> ou <u>hermitiano</u>

Obs. : operadores hermitianos podem ser considerados como generalizações dos números $\mathbb{R}$:

como $A^+_{ij} = (A^t)^*_{ij} \xrightarrow[\text{A hermitiano}]{} (A^t)^*_{ij} = A^*_{ji} = A_{ij}$;

em particular, $A_{ii} \in \mathbb{R}$!

- p/ operador hermitiano A :

$$(\psi, A\psi) = (A\psi, \psi) = (\psi, A\psi)^*$$ (8.3)

↳ <u>valor esperado</u> $(\psi, A\psi)$ do operador A no estado ψ é um número $\mathbb{R}$!

· Notação de Dirac

vimos que Eq. (3.5) : $(\psi_a, \psi_b) = \sum_{i=1}^{n} a_i^* b_i$ (9.1)

Eq. (9.1) : produto escalar é um produto propriamente ordenado entre dois vetores ψ_a e ψ_b

↳ ideia : introduzir notação que considere esse ordenamento !

considerar que :

- ψ_a [pré-fator (9.1)] ∈ espaço dos bras
  notação : $\langle \psi_a|$ ou $\langle a|$

- ψ_b [pós-fator (9.1)] ∈ espaço dos kets
  notação : $|\psi_b\rangle$ ou $|b\rangle$

↳ $(\psi_a, \psi_b) = \langle \psi_a||\psi_b\rangle = \langle \psi_a|\psi_b\rangle = \langle a|b\rangle$

notar : a distinção entre os dois espaços ~ produto escalar, em geral, não é comutativo :

$\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^* \neq \langle b|a\rangle$

Vamos considerar os dois subespaços em detalhes.

· Vetores II

(i) considerar $|a\rangle, |b\rangle$ e $|c\rangle$ ∈ espaço vetorial dos kets $\mathcal{E}$

↳ propriedades do espaço vetorial $\mathcal{E}$ [veja Eq. (1.1)] :

$\cdot\ |a\rangle + |b\rangle = |b\rangle + |c\rangle$

$\cdot\ |a\rangle + (|b\rangle + |c\rangle) = (|a\rangle + |b\rangle) + |c\rangle$

$\cdot\ (\lambda + \mu)|a\rangle = \lambda|a\rangle + \mu|a\rangle$

$\cdot\ \mu(\lambda|a\rangle) = (\mu\lambda)|a\rangle$ (10.1)

$\cdot\ \lambda(|a\rangle + |b\rangle) = \lambda|a\rangle + \lambda|b\rangle$; $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$

$\cdot\ 1 \cdot |a\rangle = |a\rangle$

$\cdot\ |a\rangle + 0 = |a\rangle$ e $0 \cdot |a\rangle = 0$

como $|c\rangle = \lambda|a\rangle + \mu|b\rangle \in \mathcal{E}$ p/ $\forall\ |a\rangle, |b\rangle \in \mathcal{E}$ e $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$

↳ $\mathcal{E}$: espaço vetorial linear. (10.2)

· considerar : conjunto de n kets $|1\rangle, |2\rangle, \ldots, |n\rangle \in \mathcal{E}$;

se a única sol. eq. : $\lambda_1|1\rangle + \lambda_2|2\rangle + \ldots + \lambda_n|n\rangle = 0$
é a sol. trivial $\lambda_1 = \lambda_2 = \ldots = \lambda_n$

↳ $|1\rangle, |2\rangle, \ldots, |n\rangle$: conjunto vetores (kets) linearmente independentes

· se o número máximo de vetores linearmente independentes $= n$
↳ $\dim \mathcal{E} = n$: dimensão espaço vetorial dos kets $\mathcal{E}$.

se $\dim \mathcal{E} = n \to +\infty \to$ espaço vetorial $\mathcal{E}$ = espaço de Hilbert
(veja detalhes pg. 3.1)

· considerar conjunto vetores (kets) linearmente independentes
$|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle, \ldots, |n\rangle \in \mathcal{E}$;

 ↳ $\forall\ |\psi\rangle \in \mathcal{E}$ = combinação linear $|i\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i |i\rangle \; ; \; a_i \in \mathbb{C} \quad : \text{ comparar Eq. (2.1)}, \qquad (11.1)$$

i.e., $|1\rangle, |2\rangle, \ldots, |n\rangle$ é um conjunto completo de vetores, i.e. uma base p/ o espaço vetorial $\mathcal{E}$

(ii) sobre o espaço vetorial dos bras $\mathcal{E}^*$.

2 hipóteses:

(i) $\exists$ correspondência one-to-one entre ket $|a\rangle$ e bra $\langle a|$:

$$|a\rangle \longleftrightarrow \langle a|$$

(ii) a correspondência é antilinear:

$$|c\rangle = \lambda|a\rangle + \mu|b\rangle \longleftrightarrow \langle c| = \lambda^*\langle a| + \mu^*\langle b| \qquad (11.2)$$

↳ espaço vetorial dos kets $\mathcal{E}$ $\xleftrightarrow{\text{DUAL}}$ espaço vetorial dos bras $\mathcal{E}^*$

· propriedades $\mathcal{E}^*$: similar propriedades $\mathcal{E}$: Eq. (10.1)

· $\dim \mathcal{E}^* = \dim \mathcal{E}$

· se $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ dado pela Eq. (11.1)

$$\hookrightarrow \langle\psi| = \sum_{i=1}^{n} a_i^* \langle i| \in \mathcal{E}^* \qquad (11.3)$$

Obs.:

(1) É possível estabelecer a correspondência (11.2) através da função $\chi = \chi(|a\rangle) \in \mathbb{C}$, i.e., χ é uma função do ket $|a\rangle$;
em particular, se χ é uma função linear do ket $|a\rangle$, temos que

$\chi(\lambda|a\rangle + \mu|b\rangle) = \lambda\chi(|a\rangle) + \mu\chi(|b\rangle) \in \mathbb{C}$; $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$;

podemos definir o bra $\langle\chi|$ através da função linear χ tal que, p/ $\forall$ ket $|a\rangle \in \mathcal{E}$:

$$\chi(|a\rangle) = \langle\chi|a\rangle \in \mathbb{C} \; ; \qquad (12.1)$$

verifica-se que o conjunto de bras $\langle\chi|$ definidos através de (12.1) constituem um espaço vetorial

(p/ detalhes, veja Sec. II.B, Cohen)

notar : $\chi = \chi(|a\rangle)$ não é um operador pois $\chi(|a\rangle)$ = número !

(2) Em geometria diferencial : kets análogos vetores contravariantes
bras " " covariantes

(iii) produto escalar.

Definição : $\langle a|b\rangle$: produto escalar entre kets $|a\rangle$ e $|b\rangle$

↳ definição ⊕ correspondência (11.2) :

produto escalar $\langle a|b\rangle$: linear w.r.t. ket $|b\rangle$
antilinear " " $|a\rangle$

· propriedades produto escalar [veja Eq. (3.1)] :

· $\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^*$ (12.2)

· $\langle a|a\rangle \geqslant 0$; se $\langle a|a\rangle = 0 \rightarrow |a\rangle = 0$

- se $\langle a|b\rangle = 0 \rightarrow |a\rangle$ e $|b\rangle$ são vetores (kets) ortogonais

· considerar $\varepsilon_1 \subset \varepsilon$ e $\varepsilon_2 \subset \varepsilon$: 2 subespaços do espaço vetorial ε;
se $\forall\ |u\rangle \in \varepsilon_1$ e $\forall\ |v\rangle \in \varepsilon_2$, $\langle u|v\rangle = 0$
↳ podemos afirmar que o subespaço ε_1 é ortogonal ao subespaço ε_2

· se $\varepsilon = \varepsilon_1 \cup \bar{\varepsilon}_1$, onde os subespaços ε_1 e $\bar{\varepsilon}_1$ são $\perp$
↳ subespaço complementar ao subespaço ε_1

verifica-se que, p/ $\forall\ |u\rangle \in \varepsilon$, temos que

$$|u\rangle = |u_1\rangle + |\bar{u}_1\rangle \quad ; \quad |u_1\rangle \in \varepsilon_1 \ \text{ e } \ |\bar{u}_1\rangle \in \varepsilon_2 \qquad (13.1)$$

↳ projeção ket $|u\rangle$ no subespaço ε_1

- se conjunto $|1\rangle, |2\rangle, \ldots, |n\rangle$ linearmente independentes e

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \qquad (13.2)$$

↳ $|1\rangle, |2\rangle, \ldots, |n\rangle$: conjunto completo kets ortonormais
(base p/ espaço vetorial ε)

↳ Eqs. (11.1) e (13.2) :

$$\langle j|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i \underbrace{\langle j|i\rangle}_{\delta_{ij}} = a_j \quad : \text{componente } |\psi\rangle \qquad (13.3)$$

Similar : Eqs. (11.3) e (13.2) :

$$\langle \psi|j\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i^* \langle i|j\rangle = a_j^*$$

· Uma consequência interessante das propriedades do produto escalar (12.2) é a desigualdade de Schwarz:

p/ $\forall$ $|a\rangle$ e $|b\rangle \in \mathcal{E}$, temos que

$$|\langle a|b\rangle|^2 \leq \langle a|a\rangle\langle b|b\rangle \quad (14.1)$$

Demonstração: considerar $|\psi\rangle = |a\rangle + \lambda|b\rangle$, $\lambda \in \mathbb{C}$

como $\langle\psi|\psi\rangle \geqslant 0$

↳ $\left(\langle a| + \lambda^*\langle b|\right)\left(|a\rangle + \lambda|b\rangle\right) \geqslant 0$

$$\langle a|a\rangle + \lambda\langle a|b\rangle + \lambda^*\langle b|a\rangle + |\lambda|^2\langle b|b\rangle \geqslant 0$$

se $\lambda = -\dfrac{\langle b|a\rangle}{\langle b|b\rangle}$

↳ $\langle a|a\rangle - \dfrac{2|\langle a|b\rangle|^2}{\langle b|b\rangle} + \dfrac{|\langle a|b\rangle|^2}{\langle b|b\rangle} \geqslant 0$

como $\langle b|b\rangle \neq 0$ -> Eq. (14.1)

notar: a igualdade em (14.1) -> $\langle\psi|\psi\rangle = 0$

↳ $|\psi\rangle = 0$ -> $|a\rangle = -\lambda|b\rangle$.

· Operadores II.

considerar operador linear A que associa ket $|u\rangle$ ao ket $|v\rangle$; temos que

$$|v\rangle = A|u\rangle \quad (14.2)$$

as propriedades (4.1) de um op. linear A assumem a forma:

· $A(|a\rangle + |b\rangle) = A|a\rangle + A|b\rangle$

$$ \tag{15.1} $$

· $A(\lambda|a\rangle) = \lambda A|a\rangle \quad ; \quad \lambda \in \mathbb{C}$

· igualdade entre operadores:

se $A = 0 \rightarrow \langle u|A|u\rangle = 0$ p/ $\forall\ |u\rangle \in \mathcal{E}$ (15.2)

↳ se $\langle u|A|u\rangle = \langle u|B|u\rangle$ p/ $\forall\ |u\rangle \in \mathcal{E} \rightarrow A = B$

De fato, a igualdade acima $\rightarrow \langle u|A-B|u\rangle = 0$

$\xrightarrow{\text{Eq. (15.2)}} A - B = 0 \rightarrow A = B$.

· operações algébricas: similar Eq. (4.2).

$$(A+B)|\psi\rangle = A|\psi\rangle + B|\psi\rangle = (B+A)|\psi\rangle$$
$$(\lambda A)|\psi\rangle = \lambda(A|\psi\rangle) \quad ; \quad \lambda \in \mathbb{C} \tag{15.3}$$
$$(AB)|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle)$$

Lembrar que, em geral, $AB \neq BA$: operadores A e B não comutam

↳ $[A, B] \equiv AB - BA$: comutador entre ops. A e B (15.4)

↳ se $[A, B] = 0 \rightarrow$ ops. A e B comutam

· propriedades algébricas dos comutadores (verificar):

$$[A, B] + [B, A] = 0$$
$$[A, A] = 0$$
$$[A, B+C] = [A, B] + [A, C] \tag{15.5}$$
$$[A+B, C] = [A, C] + [B, C]$$

$$[AB, C] = A[B,C] + [A,C]B$$
$$[A, BC] = [A,B]C + B[A,C] \qquad (16.1)$$
$$[A,[B,C]] = [C,[A,B]] = [B,[C,A]] = 0$$

· verifica-se que se operadores A e B são tais que
$[A,[A,B]] = [B,[A,B]] = 0$

$$\hookrightarrow [A, B^n] = n B^{n-1} [A,B] \quad ; \quad n \in \mathbb{Z}^+ \qquad (16.2)$$
$$[A^n, B] = n A^{n-1} [A,B]$$

· dado um certo operador A, é possível definir o operador e^A através da série de potências:

$$e^A = 1 + A + \frac{1}{2!}A^2 + \frac{1}{3!}A^3 + \ldots \qquad (16.3)$$

a partir de (16.3), verifica-se a identidade:

$$e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} = B + \lambda [A,B] + \frac{\lambda^2}{2!}[A,[A,B]] + \ldots ; \quad \lambda \in \mathbb{R} \qquad (16.4)$$

· verifica-se que se operadores A e B são tais que
$[A,[A,B]] = [B,[A,B]] = 0$

$$\hookrightarrow e^A e^B = e^{A + B + 1/2 [A,B]} \qquad (16.5)$$

Eqs. (16.4) e (16.5): exemplos diferença entre as álgebras numérica e de operadores.

Obs.: veja pg. 34 p/ detalhes definição (16.3)

· operador inverso,

considerar 2 operadores lineares A e B tais que

$$|v\rangle = A|u\rangle \quad \text{e} \quad |u\rangle = B|v\rangle \qquad (17.1)$$

↳ B é o operador inverso de A (e vice-versa)

notar Eq. (17.1) : $|v\rangle = A|u\rangle = AB|v\rangle$

$|u\rangle = B|v\rangle = BA|u\rangle \rightarrow AB = BA = 1 \qquad (17.2)$

Eqs. (17.1) e (17.2) : definições equivalentes op. inverso !

notação : A^{-1} : op. inverso op. A

↳ Eq. (17.2) : $AA^{-1} = A^{-1}A = 1 \qquad (17.2)$

propriedade : se ops. lineares A e B são tais que $\exists\, A^{-1}$ e B^{-1}

↳ $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1} \qquad (17.3)$

notar : Eq. (17.2) : $(AB)(AB)^{-1} = 1 \quad (*)$

$A^{-1}(*)$: $B(AB)^{-1} = A^{-1} \quad (**)$

$B^{-1}(**)$: $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$

Obs. : se $\exists\, A^{-1} \rightarrow$ única solução eq. $A|\psi\rangle = 0$ é $|\psi\rangle = 0$.

· ação operador A sob bras,

podemos escrever :

$$\langle c|(A|a\rangle) = (\langle c|A)|a\rangle = \langle c|A|a\rangle \qquad (17.4)$$

Eq. (17.4) pode ser utilizada p/ definir o bra $\langle c|A$, i.e. a ação do operador A sob o bra $\langle c|$!

↳ propriedades algébricas (15.3) assumem a forma:

$$\begin{aligned}\langle\psi|(A+B) &= \langle\psi|A + \langle\psi|B \\ \langle\psi|(\lambda A) &= \lambda(\langle\psi|A) \\ \langle\psi|(AB) &= (\langle\psi|A)B\end{aligned} \qquad (18.1)$$

· Produto tensorial de dois espaços vetoriais,

considerar 2 espaços vetoriais $\mathcal{E}_1$ e $\mathcal{E}_2$, tais que

· $\dim \mathcal{E}_1 = N_1$ $\qquad \{|u_i(1)\rangle\}$: base

se $|\varphi(1)\rangle \in \mathcal{E}_1 \;\rightarrow\; |\varphi(1)\rangle = \sum_i a_i |u_i(1)\rangle$ (18.2)

· $\dim \mathcal{E}_2 \cdot N_2$ $\qquad \{|v_j(2)\rangle\}$: base

se $|\chi(2)\rangle \in \mathcal{E}_2 \;\rightarrow\; |\chi(2)\rangle = \sum_j b_j |v_j(2)\rangle$ (18.3)

índice p/ indicar espaço vetorial associado.

Definição $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$: produto tensorial dos espaços $\mathcal{E}_1$ e $\mathcal{E}_2$

↳ p/ $\forall\, |\varphi(1)\rangle \in \mathcal{E}_1$ e $|\chi(2)\rangle \in \mathcal{E}_2$, $\exists$ vetor

$|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \in \mathcal{E}$: produto tensorial de $|\varphi(1)\rangle$ e $|\chi(2)\rangle$ (18.4)

Obs.: notações:

$$|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle = |\varphi(1)\rangle|\chi(2)\rangle = |\varphi(1)\chi(2)\rangle$$

· propriedade:

· $|\varphi(1)\rangle \otimes \left(\lambda |\chi_1(2)\rangle + \mu |\chi_2(2)\rangle \right) =$

$$= |\varphi(1)\rangle \otimes \left(\lambda |\chi_1(2)\rangle \right) + |\varphi(1)\rangle \otimes \left(\mu |\chi_2(2)\rangle \right)$$

$$= \lambda \left(|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi_1(2)\rangle \right) + \mu \left(|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi_2(2)\rangle \right) \; ; \; \lambda, \mu \in \mathbb{C} \qquad (19.1)$$

· $\left(\lambda |\varphi_1(1)\rangle + \mu |\varphi_2(1)\rangle \right) \otimes |\chi(2)\rangle =$

$$= \lambda \left(|\varphi_1(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \right) + \mu \left(|\varphi_2(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \right) \qquad (19.2)$$

· Eqs. (18.2) - (18.4) :

$\{ |u_i(1)\rangle \otimes |v_j(2)\rangle \}$: base espaço vetorial $\mathcal{E}$

$$\dim \mathcal{E} = N_1 N_2$$

· Eq. (18.4) pode ser escrita como:

$$|\varphi(1)\chi(2)\rangle \equiv |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle = \sum_{ij} a_i b_j \, |u_i(1)\rangle \otimes |v_j(2)\rangle \qquad (19.3)$$

coeficientes expansão = produto dos coeficientes

de fato, Eq. (19.3), caso particular ; em geral, p/ $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$:

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} c_{ij} |u_i(1)\rangle \otimes |v_j(2)\rangle \qquad (19.4)$$

Definição : se $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ não admite uma expansão do tipo (19.3) $\rightarrow$ $|\psi\rangle$ é um estado emaranhado.

(detalhes a posteriori)

· produto escalar:

como essa operação está definida em $\mathcal{E}_1$ e $\mathcal{E}_2$ é possível defini-la no espaço vetorial $\mathcal{E}$;

produto escalar entre vetores $|\varphi(1)\chi(2)\rangle$ e $|\varphi'(1)\chi'(2)\rangle$:

$$\langle \varphi(1)\chi(2) | \varphi'(1)\chi'(2)\rangle = \langle \varphi(1)|\varphi'(1)\rangle \langle \chi(2)|\chi'(2)\rangle \qquad (20.1)$$

· considerar operador linear $A(1)$ definido em $\mathcal{E}_1$ e
" " $B(2)$ " " $\mathcal{E}_2$; temos que

(i) $A(1)|\varphi(1)\chi(2)\rangle = A(1)\big(|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle\big) = \big(A(1)|\varphi(1)\rangle\big) \otimes |\chi(2)\rangle$,

em particular, se $A(1)|\varphi(1)\rangle = |\varphi'(1)\rangle$

$$\hookrightarrow A(1)|\varphi(1)\chi(2)\rangle = |\varphi'(1)\chi(2)\rangle \qquad (20.2)$$

se $|\psi\rangle$: Eq. (19.4) $\rightarrow$ $A(1)|\psi\rangle = \sum_{ij} c_{ij} \big(A(1)|u_i(1)\rangle\big) \otimes |v_j(2)\rangle$

(20.3)

similar p/ op. $B(2)$.

(ii) se $C = A(1) \otimes B(2)$

$$\hookrightarrow C|\varphi(1)\chi(2)\rangle = \big(A(1) \otimes B(2)\big)\big(|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle\big)$$

$$= \big(A(1)|\varphi(1)\rangle\big) \otimes \big(B(2)|\chi(2)\rangle\big) \qquad (20.4)$$

notar: Eq. (20.2) pode ser escrita como:

$$A(1)|\varphi(1)\chi(2)\rangle = \big(A(1) \otimes \mathbb{1}(2)\big)|\varphi(1)\chi(2)\rangle = \big(A(1)|\varphi(1)\rangle\big) \otimes |\chi(2)\rangle$$

$$B(2)|\varphi(1)\chi(2)\rangle = \big(\underbrace{\mathbb{1}(1)}_{\text{operador identidade}} \otimes B(2)\big)|\varphi(1)\chi(2)\rangle = |\varphi(1)\rangle \otimes \big(B(2)|\chi(2)\rangle\big)$$

Ex.: 2 spins $S = 1/2$,

· $\dim \mathcal{E} = 2 \cdot 2 = 4$

· base espaço $\mathcal{E}$: $|\epsilon(1)\rangle \otimes |\epsilon(2)\rangle = |\epsilon(1)\, \epsilon(2)\rangle$; $\epsilon(1), \epsilon(2) = \pm$

onde $S_i^z |\epsilon(i)\rangle = \frac{1}{2}\hbar\, \epsilon(i)\, |\epsilon(i)\rangle$; $i = 1, 2$

↳ base: $|+(1)\rangle \otimes |+(2)\rangle$, $|+(1)\rangle \otimes |-(2)\rangle$, $|-(1)\rangle \otimes |+(2)\rangle$, $|-(1)\rangle \otimes |-(2)\rangle$

ou $|++\rangle$, $|+-\rangle$, $|-+\rangle$, $|--\rangle$

partícula 1 — partícula 2

· temos que:

$$(S_1^z \otimes 1(2))\, |\epsilon(1)\rangle \otimes |\epsilon(2)\rangle = \frac{1}{2}\hbar\, \epsilon(1)\, |\epsilon(1)\rangle \otimes |\epsilon(2)\rangle$$

$$(S_1^z \otimes S_2^z)\, |\epsilon(1)\rangle \otimes |\epsilon(2)\rangle = \frac{1}{4}\hbar^2\, \epsilon(1)\epsilon(2)\, |\epsilon(1)\rangle \otimes |\epsilon(2)\rangle$$

alternativa: $S_1^z |\epsilon(1)\epsilon(2)\rangle = \frac{1}{2}\hbar\, \epsilon(1)\, |\epsilon(1)\epsilon(2)\rangle$

$$S_1^z S_2^z |\epsilon(1)\epsilon(2)\rangle = \frac{1}{4}\hbar^2\, \epsilon(1)\epsilon(2)\, |\epsilon(1)\epsilon(2)\rangle$$

· se $|\varphi(1)\rangle = \lambda_1 |+(1)\rangle + \mu_1 |-(1)\rangle \in \mathcal{E}_1$ e
$|\chi(2)\rangle = \lambda_2 |+(2)\rangle + \mu_2 |-(2)\rangle \in \mathcal{E}_2$

↳ $|\varphi(1)\chi(2)\rangle = \lambda_1\lambda_2 |++\rangle + \lambda_1\mu_2 |+-\rangle + \mu_1\lambda_2 |-+\rangle + \mu_1\mu_2 |--\rangle$

caso geral (19.4): $|\psi\rangle = \alpha|++\rangle + \beta|+-\rangle + \gamma|-+\rangle + \delta|--\rangle$

lembrar: se $\alpha\delta \neq \beta\gamma$
↳ $|\psi\rangle$ é um <u>estado</u> emaranhado

exemplos estados emaranhados:

$$|\Phi\rangle = 1/\sqrt{2}\,(|+-\rangle - |-+\rangle) \quad : \text{singleto}$$

$$|\Psi\rangle = 1/\sqrt{2}\,(|+-\rangle + |++\rangle) \quad : \text{tripleto} \qquad (21.1)$$

· operador adjunto II.

Lembrar definição operador adjunto A^{+}, Eq. (7.3):

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

em termos de bras e kets: $\underbrace{\langle\psi|}A^{+}|\psi'\rangle = \langle\psi'|\underbrace{A|\psi\rangle}^{*}$ (21.2)

identificando: $\langle\Phi|$ $\quad|\Phi\rangle$

↳ relação: $|\Phi\rangle = A|\psi\rangle \longleftrightarrow \langle\Phi| = \langle\psi|A^{+}$ (21.3)

Eq. (21.2): definição op. adjunto (hermitiano conjugado) A^{+}
do operador A

- alternativa: considerar op. A tal que $|\Phi\rangle = A|\psi\rangle$ (*);

dadas as relações $|\Phi\rangle \leftrightarrow \langle\Phi|$ e $|\psi\rangle \leftrightarrow \langle\psi|$,
a fim de se estabelecer a equação correspondente
a (*) no espaço dual $\mathcal{E}^{*}$, define-se op. A^{+} tal que
$\langle\Phi| = \langle\psi|A^{+}$;
verifica-se que se A op. linear $\rightarrow$ A^{+} op. linear

como $\langle\Phi|\psi'\rangle = \langle\psi'|\Phi\rangle^{*}$ $\rightarrow$ $\langle\psi|A^{+}|\psi'\rangle = \langle\psi'|A|\Phi\rangle^{*}$: Eq. (21.2)

- se $A^\dagger = A$ -> operador A é autoadjunto ou hermitiano

↳ Eq. (21.2) : $\langle \psi | A | \psi' \rangle = \langle \psi' | A | \psi \rangle^*$

em particular : $\langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle^*$ -> valor esperado
$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \in \mathbb{R}$.

· Definição : operador hermitiano A é positivo definido se
p/ $\forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{E}$

$$\langle \psi | A | \psi \rangle \geq 0 \qquad (22.1)$$

- p/ op. hermitiano A positivo definido, verifica-se que :

$$|\langle a | A | b \rangle|^2 \leq \langle a | A | a \rangle \langle b | A | b \rangle \; ; \; \text{p/ } \forall\, |a\rangle, |b\rangle \in \mathcal{E} \qquad (22.2)$$

Eq. (22.2) : generalização da desigualdade de Schwarz (7.1)

notar : Eq. (22.2) ⊕ $A = 1$ = Eq. (7.1)

- verifica-se que a igualdade em (22.1), i.e., $\langle \psi | A | \psi \rangle = 0$

↳ $A|\psi\rangle = 0$!

· Operador unitário,
considerar operador linear U tal que $\exists\, U^{-1}$;
se $U^{-1} = U^\dagger$ -> operador U é unitário

Eq. (17.2) : $UU^{-1} = U^{-1}U = 1$ -> $UU^\dagger = U^\dagger U = 1$ (22.3)

Obs. : ops. unitários podem ser considerados como
generalizações de números $\mathbb{C}$ de módulo 1 !

propriedade: se U e V ops. unitários $\rightarrow$ $W = UV$: op. unitário;

notar: $W^{-1} = (UV)^{-1} \underset{\uparrow}{=} V^{-1}U^{-1} = V^{+}U^{+} \underset{\uparrow}{=} (UV)^{+} = W^{+}$

Eq. (17.3) ; Eq. (8.2)

· Definição: operador linear A é um operador normal se

$$[A, A^{+}] = 0 \tag{23.1}$$

notar: se A op. hermitiano $\rightarrow$ A op. normal
se U op. unitário $\rightarrow$ U op. normal

considerar op. arbitrário B; podemos escrever:

$$B = \tfrac{1}{2}B + \tfrac{1}{2}B + \tfrac{1}{2}B^{+} - \tfrac{1}{2}B^{+} = \frac{1}{2}(B + B^{+}) + i \cdot \frac{1}{2i}(B - B^{+})$$

$$\equiv B_1 + i B_2$$

Como $B_1 = B_1^{+}$ e $B_2 = B_2^{+}$

$\hookrightarrow$ $[B, B^{+}] = [B_1 + iB_2, B_1 - iB_2] = -i[B_1, B_2] + i[B_2, B_1]$

$= -2i[B_1, B_2]$ $\rightarrow$ se $[B_1, B_2] = 0$ $\rightarrow$ B é op. normal.

· problema de autovalores e observáveis,

Considerar operador linear A; se

$$A|u\rangle = a|u\rangle \tag{23.2}$$

|definição, a: autovalor op. A
$|u\rangle$: autovetor associado ao autovalor a

tilibra

notar:

- se $|v\rangle = \lambda|u\rangle$; $\lambda \in \mathbb{C}$

↳ $A|v\rangle = A(\lambda|u\rangle) = \lambda(A|u\rangle) = a(\lambda|u\rangle) = a|v\rangle$

↳ se $|u\rangle$: autovetor op. A associado ao autovalor a

↳ $|v\rangle = \lambda|u\rangle$: " " " " " " "

- considerar $A|u_i\rangle = a|u_i\rangle$; $i = 1, 2, \ldots, N$ e

$|u_i\rangle$: conjunto vetores linearmente independentes

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

↳ $A|\psi\rangle = \sum_i c_i A|u_i\rangle = a \sum_i c_i |u_i\rangle = a|\psi\rangle$: $|\psi\rangle$ é autovetor op. A c/ autovalor a

↳ $|u_i\rangle$: base subespaço dim = N : subespaço do autovalor a

definição : se N = 1 : autovalor a é não-degenerado

se N > 1 : " " é degenerado

Obs.: considerações análogas válidas p/ $\langle u|A = a'\langle u|$.

hipótese: op. linear A é hermitiano, i.e., $A = A^{\dagger}$

↳ propriedades do problema de autovalores:

(i) todos os autovalores op. A são $\mathbb{R}$;

(24.1)

(ii) autovetores associados a diferentes autovalores são ortogonais.

Vamos verificar (i) e (ii):

(i) se $A|u\rangle = a|u\rangle \rightarrow \langle u|A|u\rangle = a\langle u|u\rangle$

Eq. (21.2) : $\langle u|A^{+}|u\rangle = \langle u|A|u\rangle = \langle u|A|u\rangle^{*} \rightarrow \langle u|A|u\rangle \in \mathbb{R}$

como $\langle u|u\rangle \in \mathbb{R} \rightarrow a \in \mathbb{R}$!

(ii) se $A|u\rangle = a|u\rangle$

e $A|v\rangle = b|v\rangle \rightarrow \langle v|A = b\langle v|$

↳ $\langle v|A|u\rangle = a\langle v|u\rangle$ $\xrightarrow{\ominus}$ $0 = (a-b)\langle v|u\rangle$

$\langle v|A|u\rangle = b\langle u|u\rangle$

↳ se $a \neq b \rightarrow \langle v|u\rangle = 0$!

Obs. : se autovalor a é degenerado, é possível escolher um conjunto de vetores linearmente independentes $|u_i\rangle$ tal que $\langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij}$ via o processo de ortogonalização de Schmidt, i.e., é possível construir uma base ortonormal p/ o subespaço do autovalor a (veja Sec. V.5, Messiah).

Definição : se os autovetores $|u_i\rangle$ do operador hermitiano A é um conjunto completo de vetores, i.e., uma base p/ o espaço vetorial $\varepsilon \rightarrow$ op. A é um observável

próxima etapa : determinação da relação de completeza : expressão que indica que op. A é um observável

inicial : considerações sobre projetor.

· Projetor.

considerar espaço vetorial $\mathcal{E} = S \cup \bar{S}$

↳ subespaço complementar ao " S.

p/ $\forall\ |u\rangle \in \mathcal{E}$, temos que

Eq. (13.1) : $|u\rangle = |u_S\rangle + |\bar{u}_S\rangle$; $|u_S\rangle \in S$ e $|\bar{u}_S\rangle \in \bar{S}$ (26.1)

↳ projeção $|u\rangle$ no subespaço $\bar{S}$

" " " " S

como a correspondência entre $|u\rangle$ e $|u_S\rangle$ é única e linear

↳ define-se o operador (linear) de projeção ou projetor P_S :

$$P_S|u\rangle = |u_S\rangle \tag{26.2}$$

propriedades:

(i) P_S é um op. hermitiano,

p/ $\forall\ |u\rangle$ e $|v\rangle \in \mathcal{E}$, temos que

$$\langle u|P_S|v\rangle = \langle u|v_S\rangle = \langle u_S|v_S\rangle = \langle u_S|v\rangle$$

como $|v\rangle$ é arbitrário $\rightarrow \langle u|P_S = \langle u_S|$

(ii) $P_S^2 = P_S$: Eq. (5.2)

p/ $\forall\ |u\rangle \in \mathcal{E}$, temos que

$$P_S^2|u\rangle = P_S\big(P_S|u\rangle\big) = P_S|u_S\rangle = |u_S\rangle = P_S|u\rangle$$

como $|u\rangle$ é arbitrário $\rightarrow P_S^2 = P_S$

/ /

(iii) autovalores P_s = 0, 1.

se $P_s|\psi\rangle = p|\psi\rangle \rightarrow \underbrace{(P_s^2 - P_s)}_{=0}|\psi\rangle = (p^2 - p)|\psi\rangle = 0$

como $|\psi\rangle \neq 0 \rightarrow p = 0, 1$.

notar: se $P_s|\psi\rangle = |\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle \in S$: subespaço do autovalor $\underline{1}$

se $P_s|\psi\rangle = 0 \rightarrow |\psi\rangle \in \bar{S}$: " " " $\underline{0}$

(iv) autovetores P_s : conjunto completo de vetores

p/ $\forall$ $|u\rangle \in \mathcal{E}$, temos que

$$|u\rangle = |u\rangle + P_s|u\rangle - P_s|u\rangle = P_s|u\rangle + (1 - P_s)|u\rangle \qquad (27.1)$$

notar:

- $P_s(P_s|u\rangle) = P_s^2|u\rangle = P_s|u\rangle$: $P_s|u\rangle$ autovetor P_s, autovalor $\underline{1}$

- $P_s\big((1-P_s)|u\rangle\big) = (P_s^2 - P_s)|u\rangle = 0$: $(1-P_s)|u\rangle$ " " , " $\underline{0}$

- $\big(\langle u|P_s\big)\big((1-P_s)|u\rangle\big) = \langle u|P_s^2 - P_s|u\rangle = 0$

↳ Eq. (27.1) : autovetores P_s = base p/ espaço vetorial $\mathcal{E}$!

· propriedades (ii) e (iv) → projetor P_s é um observável !

Obs.: verifica-se que ("VOLTA") se op. hermitiano P é tal que

$P^2 = P \rightarrow$ op. P é um projetor (27.2)

Ex. 1: considerar $|a\rangle \in \mathcal{E}$; $\langle a|a\rangle = 1$

Ket $|a\rangle$ define um subespaço dim 1

p/ $\forall$ $|u\rangle \in \mathcal{E}$, temos que

tilibra

$|u\rangle = |u_a\rangle + |\bar{u}_a\rangle$: Eq. (26.1)

projeção $|u\rangle$ subespaço definido por $|a\rangle$

$= \lambda|a\rangle + |\bar{u}_a\rangle$, $\lambda \in \mathbb{C}$, pois subespaço dim = 1

↳ $\langle a|u\rangle = \lambda \underbrace{\langle a|a\rangle}_{1} + \underbrace{\langle a|\bar{u}_a\rangle}_{0} \rightarrow \lambda = \langle a|u\rangle$

↳ $|u\rangle = \lambda|a\rangle = \langle a|u\rangle|a\rangle = |a\rangle\langle a|u\rangle = P_a|u\rangle$

↳ $P_a = |a\rangle\langle a|$: projetor subespaço definido por $|a\rangle$ (28.1)
(veja Eq. (5.1))

Ex. 2: conjunto de vetores ortonormais $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |N\rangle \in \mathcal{E}$, i.e.,
$\langle m|n\rangle = \delta_{m,n}$

↳ vetores $|m\rangle$: base p/ um subespaço $\mathcal{E}_s \subset \mathcal{E}$; dim $\mathcal{E}_s = N$

Eq. (28.1) $\rightarrow$ $P_s = \sum_{m=1}^{N} |m\rangle\langle m|$: projetor ~ subespaço $\mathcal{E}_s$ (28.2)

· álgebra dos projetores,

considerar : P_i : projetor associado ao subespaço $\mathcal{E}_i$
P_j : " " " " $\mathcal{E}_j$

(i) $P = P_i P_j$ é um projetor se $[P_i, P_j] = 0$,

notar : $P^\dagger = (P_i P_j)^\dagger = P_j^\dagger P_i^\dagger = P_j P_i = P_i P_j = P$
$\rightarrow [P_i, P_j] = 0$

$P^2 = P_i P_j P_i P_j = P_i^2 P_j^2 = P_i P_j = P$

Eq. (27.2) $\rightarrow$ P é um projetor !

subespaço $\mathcal{E}_{ij}$ associado a P : $\mathcal{E}_{ij} = \mathcal{E}_i \cap \mathcal{E}_j$

(ii) subespaço $\mathcal{E}_i$ é ortogonal ao subespaço $\mathcal{E}_j$ se $P_i P_j = P_j P_i = 0$.

considerar $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_j$ e $|\psi\rangle \notin \mathcal{E}_i$

↳ $P_j|\psi\rangle = |\psi\rangle$ → $P_i(P_j|\psi\rangle) = P_i(|\psi\rangle) = 0$ → $P_i P_j = 0$

e $P_i|\psi\rangle = 0$

similar: verifica-se que $P_j P_i = 0$

(iii) $P = P_i + P_j$ é projetor se $P_i P_j = P_j P_i = 0$.

notar: $P^\dagger = P_i^\dagger + P_j^\dagger = P_i + P_j = P$

$$P^2 = (P_i + P_j)(P_i + P_j) = P_i^2 + \underbrace{P_i P_j}_{0} + \underbrace{P_j P_i}_{0} + P_j^2 = P_i + P_j = P$$

$\xrightarrow{\text{Eq. (27.2)}}$ P é um projetor

subespaço $\mathcal{E}_{ij}$ associado a P: $\mathcal{E}_{ij} = \mathcal{E}_i \oplus \mathcal{E}_j$

Obs.: resultado acima pode ser generalizado p/

$P = P_1 + P_2 + \dots + P_N$, onde $P_i P_j = 0$, $i,j = 1,2,\dots,N$

notar: Eq. (28.2) pode ser escrita como

$P_s = \sum_{m=1}^{N} P_m$; $P_m = |m\rangle\langle m|$: projetor ~ subespaço $\mathcal{E}_m$ definido por $|m\rangle$

como $P_m P_n = |m\rangle\underbrace{\langle m|n\rangle}_{0}\langle n| = 0$ p/ $m \neq n$

↳ $\mathcal{E}_s = \mathcal{E}_1 \oplus \mathcal{E}_2 \oplus \dots \oplus \mathcal{E}_m$ e $\dim \mathcal{E}_s = \sum_{m=1}^{N} \dim \mathcal{E}_m = N$!

· Observáveis c/ espectro discreto

considerar op. hermitiano A cujos autovalores são
$a_1, a_2, \ldots, a_n, \ldots$: conjunto discreto : espectro discreto

↳ $\mathcal{E}_n$: subespaço associado ao autovalor a_n
P_n : projetor " subespaço $\mathcal{E}_n$; Lembrar (24.1) :
$P_n P_m = 0 \, , \; n \neq m$!

se a_n não-degenerado : $P_n = |n\rangle\langle n|$

(30.1)

se a_n degenerado : $P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |n i\rangle\langle n i|$; $\dim \mathcal{E}_n = g_n$

↳ $P_A \equiv \sum_n P_n$: projetor associado subespaço
$\mathcal{E}_A = \mathcal{E}_1 \oplus \mathcal{E}_2 \oplus \ldots$

(*) se op. A é um observável -> $\mathcal{E}_A = \mathcal{E}$ e

$$P_A = \sum_n P_n = 1 \quad \text{: decomposição da unidade w.r.t. autovalores de } A \qquad (30.2)$$

Eqs. (30.1) e (30.2) :

$$P_A = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |n i\rangle\langle n i| = 1 \quad \text{: relação de completeza} \qquad (30.3)$$

(*) Eq. (30.3) ⊕ $\langle n i | m j\rangle = \delta_{n,m}\delta_{i,j}$

↳ vetores $|n i\rangle$: conjunto completo vetores ortonormais
(base ortonormal espaço $\mathcal{E}$)

notar:
p/ $\forall \, |u\rangle \in \mathcal{E}$:

$$|u\rangle = 1 \cdot |u\rangle = \sum_{n,i} |n i\rangle\langle n i | u\rangle = \sum_{n,i} \langle n i | u\rangle \, |n i\rangle \qquad (30.4)$$

· op. hermitiano A pode ser escrito como

$$A = AP_A = A \cdot 1 = A \sum_n P_n = \sum_{n,i} A|n i\rangle\langle n i| = \sum_{n,i} a_n |n i\rangle\langle n i|$$

$$= \sum_n a_n \left(\sum_i |n i\rangle\langle n i| \right) = \sum_n a_n P_n$$

↳ $A = \sum_n a_n P_n = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} a_n |n i\rangle\langle n i|$: decomposição espectral op. hermitiano A (31.1)

notar Eq. (31.1) : observável A é completamente definido pelo seu conjunto de autovalores e autovetores !

· Espaços contínuos.

Até o momento, consideramos que $\dim \mathcal{E} = N$ é tal que $N < +\infty$ ou $N \to +\infty$ (enumerável);
entretanto, é necessário considerarmos o caso $N \to +\infty$ (inumerável), pois há observáveis, e.g., posição e momento, que apresentam um espectro contínuo.

ideia : considerar o espaço contínuo de modo análogo ao espaço discreto;
nesse caso, é necessário determinar o equivalente p/ o caso contínuo das expressões obtidas p/ o caso discreto;
essa etapa é realizada através das substituições :

$i \to \alpha$ (31.2)

$\sum_i \to \int d\alpha$ $\qquad \delta_{ij} \to \delta(\alpha - \alpha')$

· considerar $|z\rangle \in \mathcal{E}$, z índice contínuo, $z_1 < z < z_2$;
a condição (10.2), $\mathcal{E}$ espaço vetorial linear, assume a forma:

$$|\omega\rangle = \int_{z_1}^{z_2} dz\, \lambda(z)\, |z\rangle \in \mathcal{E} \; ; \; \lambda(z) \in \mathbb{C} \; : \qquad (32.1)$$

: $|\omega\rangle$ = combinação linear vetores $|z\rangle$

· se vetores $|z\rangle \in \mathcal{E}$: base ortonormal p/ espaço $\mathcal{E}$

↳ $\langle z | z' \rangle = \delta(z - z')$: condição de ortonormalização (32.2)

p/ $\forall$ $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$: $\quad |\psi\rangle = \int dz\, \psi(z)\, |z\rangle \; ; \; \psi(z) \in \mathbb{C}$ (32.3)

: comparar Eq. (11.1)

· correspondência bra-ket (11.2):

$$|\psi\rangle = \int dz\, \psi(z)\, |z\rangle \longleftrightarrow \langle \psi | = \int dz\, \psi^*(z)\, \langle z |$$

· produto escalar,

se $|\psi\rangle = \int dz\, \psi(z)\, |z\rangle$ e $|\varphi\rangle = \int dz\, \varphi(z)\, |z\rangle$

↳ $$\langle \varphi | \psi \rangle = \int dz\, dz'\, \varphi^*(z')\, \underbrace{\langle z' | z \rangle}_{\delta(z'-z)}\, \psi(z) = \int dz\, \varphi^*(z)\, \psi(z)$$

(32.4)

em particular, $\langle \psi | \psi \rangle = \int dz\, |\psi(z)|^2$

notar: $\langle z | \psi \rangle = \int dz'\, \psi(z')\, \langle z | z' \rangle = \psi(z)$ (32.5)

· considerar observável A tal que

$A|\nu\rangle = a(\nu)|\nu\rangle$; ν: índice contínuo ;

$a(\nu)$: função monotônica $\mathbb{C}$: espectro contínuo (33.1)

como vetores $|\nu\rangle$: base ortonormal p/ espaço $\mathcal{E}$

↳ $\langle\nu|\nu'\rangle = \delta(\nu-\nu')$ e $P_A = \int d\nu\, |\nu\rangle\langle\nu| = 1$ (33.2)

: relação de completeza

p/ $\forall\, |\psi\rangle \in \mathcal{E}$, temos que

$$|\psi\rangle = 1\cdot|\psi\rangle = \int d\nu\, |\nu\rangle\underbrace{\langle\nu|\psi\rangle}_{=\psi(\nu)} = \int d\nu\, \psi(\nu)|\nu\rangle$$: comparar Eq. (30.4)

o op. hermitiano A pode ser escrito como (veja Eq. (31.1))

$$A = 1\cdot A = \int d\nu\, A|\nu\rangle\langle\nu| = \int d\nu\, a(\nu)|\nu\rangle\langle\nu|$$: decomposição espectral op. hermitiano A (33.3)

· caso geral : considerar op. hermitiano A, espectro parte discreta e parte contínua ;

Ex. : átomo H : estados ligados (discreto)
" de espalhamento (contínuo)

↳ $A|n,i\rangle = a_n|n,i\rangle$; $n = 1,2,\ldots$ $i = 1,2,\ldots,g_n$

$A|\nu\rangle = a(\nu)|\nu\rangle$; $\nu_1 \leq \nu \leq \nu_2$

$\langle n,i|m,j\rangle = \delta_{n,m}\delta_{i,j}$ $\langle\nu|\nu'\rangle = \delta(\nu-\nu')$

$\langle n,i|\nu\rangle = 0$

relação de completeza:

$$P_A = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |n,i\rangle\langle n,i| + \int_{\nu_1}^{\nu_2} d\nu\, |\nu\rangle\langle\nu| = 1 \qquad (34.1)$$

p/ $\forall\ |\psi\rangle \in \mathcal{E}$:

$$|\psi\rangle = 1\cdot|\psi\rangle = \sum_{n,i} |n,i\rangle\langle n,i|\psi\rangle + \int_{\nu_1}^{\nu_2} d\nu\, |\nu\rangle\langle\nu|\psi\rangle$$

e

$$A = 1\cdot A = \sum_{n,i} A|n,i\rangle\langle n,i| + \int_{\nu_1}^{\nu_2} d\nu\, A|\nu\rangle\langle\nu|$$

$$= \sum_{n,i} a_n |n,i\rangle\langle n,i| + \int_{\nu_1}^{\nu_2} d\nu\, a(\nu)\, |\nu\rangle\langle\nu| \qquad (34.2)$$

Obs.: operadores posição e momento discutidos Cap. VIII, Messiah.

· Funções de operadores,

vimos que, dado um certo operador linear A, é possível definir o operador e^A: Eq. (16.3);

em geral, é possível definir operador F(A): função operador A;

considerar função $F = F(z)$ que admite uma expansão em série de potências em um certo domínio:

$$F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n z^n \qquad (34.3)$$

↳ definição operador F(A): $F(A) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n A^n$ (34.4)

coeficientes de (34.3)!

notar: operador e^A (Eq. (16.3)) é definido como (34.4)

· hipótese: operador A é um observável;
nesse caso, temos outra possibilidade p/ definir op. $F(A)$;

considerar função arbitrária $F = F(z)$; como $A|a\rangle = a|a\rangle$

↳ definição operador $F(A)$: $F(A)|a\rangle = f(a)|a\rangle$ (35.1)

notar: - nesse caso, não é necessário utilizar a expansão em série da função $F = F(z)$;
- apesar op. A hermitiano, em geral, $F \neq F^{+}$.

Eq. (35.1) → se $|a\rangle$ é autovetor op. A →
" " " " $F(A)$

verifica-se que ("VOLTA") se os autovetores observável A = = autovetores op. linear F → $F = F(A)$.

considerar que a decomposição espectral do observável A é dada por

$$A = \sum_n a_n |n\rangle\langle n| + \int_{\nu_1}^{\nu_2} d\nu\, a(\nu)\, |\nu\rangle\langle\nu|$$: Eq. (34.2) p/ espectro discreto não-degenerado

$$\hookrightarrow F(A) = 1 \cdot F(A) = \sum_n F(a_n)|n\rangle\langle n| + \int_{\nu_1}^{\nu_2} d\nu\, F\big(a(\nu)\big)\, |\nu\rangle\langle\nu| :$$

: decomposição espectral op. $F(A)$

· Observáveis que comutam,

considerar 2 observaveis A e B tais que

$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$ e $B|\psi\rangle = b|\psi\rangle$ (hipótese: espectros discretos)

↳ $A(B|\psi\rangle) = A(b|\psi\rangle) = ab|\psi\rangle$

$B(A|\psi\rangle) = B(a|\psi\rangle) = ab|\psi\rangle$ → $(AB - BA)|\psi\rangle = [A,B]|\psi\rangle = 0$ ∴

∴ $|\psi\rangle$ é autovetor $[A,B]$ c/ autovalor $\underline{0}$

De fato, verifica-se que, p/ 2 observáveis A e B:

(i) se $[A,B] = 0$ → ∃ pelo menos uma base comum ~ A e B

e ("VOLTA") (36.1)

(ii) se ∃ base comum ~ observáveis A e B → $[A,B] = 0$

Vamos verificar (ii); o resultado (i) será demonstrado a posteriori

considerar: $A|a_n, b_m, i\rangle = a_n|a_n, b_m, i\rangle$; $i = 1, 2, \ldots, g_{nm}$:

$B|a_n, b_m, i\rangle = b_m|a_n, b_m, i\rangle$ possível degenerescência subespaço ~ a_n e b_m !

(36.2)

↳ $A(B|a_n, b_m, i\rangle) = A(b_m|a_n, b_m, i\rangle) = a_n b_m|a_n, b_m, i\rangle$

$B(A|a_n, b_m, i\rangle) = B(a_n|a_n, b_m, i\rangle) = a_n b_m|a_n, b_m, i\rangle$

↳ $[A,B]|a_n, b_m, i\rangle = 0$

como $\forall\ |\psi\rangle \in \mathcal{E}$ pode ser expandido em termos de $|a_n, b_m, i\rangle$

↳ $[A,B]|\psi\rangle = 0$ $\xrightarrow{|\psi\rangle \text{ arbitrário}}$ $[A,B] = 0$

· a degenerescência em (36.2) poderia, em princípio, ser removida, considerando-se um terceiro observável C tal que $[A,C] = [B,C] = 0$; nesse caso, temos

$A|a_n, b_m, c_k\rangle = a_n|a_n, b_m, c_k\rangle$
$B|a_n, b_m, c_k\rangle = b_m|a_n, b_m, c_k\rangle$
$C|a_n, b_m, c_k\rangle = c_k|a_n, b_m, c_k\rangle$

notar: conjunto de autovalores a_n, b_m e c_k definem um único elemento da base comum!

↳ Definição: conjunto completo de observáveis que comutam: conjunto de observáveis $A, B, C, D, \dots, K$ tais que $[A,B] = [A,C] = [B,C] = \dots = 0$ e $\exists$ uma única base comum associada a esse conjunto de observáveis.

· Teoria de representação.
ideia: verificar que, dada uma certa base p/ o espaço vetorial $\mathcal{E}$, vetores $|u\rangle \in \mathcal{E}$ e operadores A associados ao espaço $\mathcal{E}$ podem ser escritos como matrizes

• inicial: considerações sobre matrizes finitas.

considerar matriz $A_{M\times N}$;
A_{ij} : elemento matriz A
podemos definir:
(i) matriz conjugada $A^*_{M\times N} : (A^*)_{ij} = A^*_{ij}$
(ii) " transposta $A^t_{N\times M} : (A^t)_{ij} = A_{ji}$ (37.1)
(iii) " hermitiana conjugada $A^\dagger_{N\times M} : (A^\dagger)_{ij} = A^*_{ji}$

operações algébricas:

(i) multiplicação por cte λA, $\lambda \in \mathbb{C}$: $(\lambda A)_{ij} = \lambda A_{ij}$
(ii) soma $C = A + B$: $C_{ij} = A_{ij} + B_{ij}$
(iii) multiplicação $C = A \cdot B$: $C_{ij} = \sum_{k=1}^{\bar{K}} A_{ik} B_{kj}$ onde (37.2)

$C_{M\times N}$, $A_{M\times \bar{K}}$ e $B_{\bar{K}\times N}$

verifica-se que: $(A+B)^* = A^* + B^*$ $\quad (AB)^* = A^* B^*$

$(A+B)^t = A^t + B^t$ $\quad (AB)^t = B^t A^t$

$(A+B)^+ = A^+ + B^+$ $\quad (AB)^+ = B^+ A^+$

(iv) produto tensorial $C = A \otimes B$:

se $A_{M\times N}$ e $B_{M'\times N'}$ $\rightarrow$ $C_{MM'\times NN'}$ e $C_{ik;jl} = A_{ij} B_{kl}$ (38.1)

· considerar caso particular: matrizes $\square$ ordem N;

(1) $\mathrm{Tr}\, A = \sum_{i=1}^{N} A_{ii}$: traço matriz $A_{N\times N}$

verifica-se que: $\mathrm{Tr}(AB) = \mathrm{Tr}(BA)$ (38.2)

$\mathrm{Tr}(ABC) = \mathrm{Tr}(CAB) = \mathrm{Tr}(BCA)$

(2) $\det A$: determinante A

verifica-se que: $\det(AB) = \det A \cdot \det B$

(3) matriz identidade I : $I_{ij} = \delta_{ij}$

(4) matriz constante $A = \lambda I$; $\lambda \in \mathbb{C}$

(5) matriz diagonal A : $A_{ij} \neq 0$ apenas se $i=j$

verifica-se que se $A = \lambda I_{N\times N}$ $\rightarrow$ $\forall B$ (38.3)

(6) matriz inversa A^{-1} : se $AB = BA = 1$ $\rightarrow$ $B = A^{-1}$

se $\det A \neq 0$ $\rightarrow$ $\exists A^{-1}$

se $\det A = 0$ $\rightarrow$ A é uma matriz singular verifica-se que : $(A^t)^{-1} = (A^{-1})^t$ $\quad (A^*)^{-1} = (A^{-1})^*$ $\quad (A^\dagger)^{-1} = (A^{-1})^\dagger$

e $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$

(7) se $AA^t = A^tA = 1$, i.e., $A^t = A^{-1}$ -> A : matriz ortogonal

(8) se $UU^\dagger = U^\dagger U = 1$, i.e., $U^\dagger = U^{-1}$ -> U : matriz unitária

· verifica-se que se $A_{N\times N}$ é uma matriz singular
↳ ∃ pelo menos um vetor coluna u tal que $Au = 0$ (39.1)

- considerar A e B matrizes □ ordem N;
Eq. (39.1) -> se ∃ λ : solução equação $\det(A - \lambda B) = 0$
↳ ∃ vetor coluna u tal que $Au = \lambda B u$

caso particular $B = I$: se ∃ λ solução equação

$$\det(A - \lambda I) = 0 \quad \text{: eq. secular da matriz } A \tag{39.2}$$

↳ ∃ vetor coluna u tal que $Au = \lambda u$

· sobre matrizes ordem infinita,
em princípio, as definições/propriedades caso $N < +\infty$ podem ser estendidas p/ caso $N = +\infty$ enumerável e inumerável;

notar: se $A(q,q')$, $q_1 \leq q, q' \leq q_2$: elemento matriz A;
$B(q,q')$, " " " B e
$C = AB$

↳ $C(q,q') = \int_{q_1}^{q_2} dq'' \, A(q,q'') B(q'',q)$: elemento matriz C. : comparar Eq. (37.2) se $A(q,q') = a(q)\,\delta(q-q')$, onde $a = a(q) \in \mathbb{C}$: A é uma matriz diagonal

se $u(q)$: componente vetor coluna $\underset{\sim}{u}$ e $\underset{\sim}{v} = A\underset{\sim}{u}$

↳ $v(q) = \int_{q_1}^{q_2} dq'\, A(q,q')\, u(q') = a(q)\, u(q)$: componente vetor coluna $\underset{\sim}{u}$

Obs. matriz inversa : ≠ caso $N < +\infty$, $AB = 1$ não necessariamente → $BA = 1$

Lembrar definição matriz inversa : $AB = BA = 1$.

· Representação de vetores e operadores por matrizes.

Considerar : vetores $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |N\rangle$: base espaço vetorial $\mathcal{E}$;
em particular, $|n\rangle$ autovetores observável Q :
$$Q|n\rangle = q_n|n\rangle$$

lembrar que
Eq. (30.3) : $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$ e $P_Q = \sum_n |n\rangle\langle n| = 1$ (40.1)

↳ podemos afirmar:
vetores $|n\rangle$: base da representação Q ;
Eq. (40.1) : eqs. fundamentais da representação Q.

notar:
(i) p/ ∀ $|u\rangle \in \mathcal{E}$: $|u\rangle = P_Q|u\rangle = \sum_n |n\rangle \underbrace{\langle n|u\rangle}_{\equiv u_n}$: elementos matriz coluna

$$\begin{pmatrix} \langle 1|u\rangle \\ \langle 2|u\rangle \\ \vdots \\ \langle N|u\rangle \end{pmatrix}$$: matriz que representa vetor $|u\rangle$ na representação Q.

(ii) similar, p/ $\forall \langle v| \in \mathcal{E}^*$: $\langle v| = \langle v|P_Q = \sum_n \langle v|n\rangle\langle n|$

$v_n^* = \langle v|n\rangle$: elementos matriz linha

$\begin{pmatrix} \langle v|1\rangle & \langle v|2\rangle & \cdots & \langle v|N\rangle \end{pmatrix}$: matriz que representa vetor $\langle v|$ na representação Q

(iii) operador linear A associado ao espaço $\mathcal{E}$:

$$A = P_Q A P_Q = \sum_{nm} |m\rangle\underbrace{\langle m|A|n\rangle}\langle n|$$

A_{mn} : elementos matriz □ : comparar Eq. (6.4)

$$\begin{pmatrix} \langle 1|A|1\rangle & \langle 1|A|2\rangle & \cdots & \langle 1|A|N\rangle \\ \langle 2|A|1\rangle & \langle 2|A|2\rangle & \cdots & \langle 2|A|N\rangle \\ \vdots & & & \\ \langle N|A|1\rangle & \langle N|A|2\rangle & \cdots & \langle N|A|N\rangle \end{pmatrix}$$: matriz que representa operador A na representação Q

notar: $\exists$ correspondência única vetores $\in \mathcal{E}$/ operadores $\longleftrightarrow$ matrizes

próxima etapa:
verificar como operações entre vetores e operadores em $\mathcal{E}$ $\longleftrightarrow$ operações matriciais

(i) conjugação operadores: similar operações matriciais, e.g., p/ operadores A e A^+, temos que:

$$A^+_{mn} = \langle m|A^+|n\rangle \underset{\text{Eq. (21.2)}}{\overset{\uparrow}{=}} \langle n|A|m\rangle^* = A^*_{nm}$$: comparar Eq. (37.1)

(ii) operações algébricas entre vetores e operadores: similar
" " " matrizes.

e.g., se operador $C = \lambda A + \mu B$, $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$, temos que:

$$C_{mn} = \langle m | \lambda A + \mu B | n \rangle = \lambda \langle m | A | n \rangle + \mu \langle m | B | n \rangle$$
$$= \lambda A_{mn} + \mu B_{mn} \quad : \text{ comparar Eq. (37.2)}$$

se $C = AB$, temos que:

$$C_{mn} = \langle m | A P_Q B | n \rangle = \sum_k \langle m | A | k \rangle \langle k | B | n \rangle$$
$$= \sum_k A_{mk} B_{kn} \quad : \text{ comparar Eq. (37.2)}$$

(iii) produto escalar $|u\rangle$ por $|v\rangle$:

$$\langle u | v \rangle = \langle u | P_Q | v \rangle = \sum_n \langle u | n \rangle \langle n | v \rangle = \sum_n u_n^* v_n$$

ou, em forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \langle u|1\rangle & \langle u|2\rangle & \dots & \langle u|N\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1|v\rangle \\ \langle 2|v\rangle \\ \vdots \\ \langle N|v\rangle \end{pmatrix} \qquad (42.1)$$

(iv) ação operador A sob vetor $|u\rangle$.

se $|v\rangle = A|u\rangle$

$\hookrightarrow \langle n | v \rangle = \langle n | A | u \rangle = \langle n | A P_Q | u \rangle = \sum_m \langle n | A | m \rangle \langle m | u \rangle$

em forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \langle 1|v\rangle \\ \langle 2|v\rangle \\ \vdots \\ \langle N|v\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1|A|1\rangle & \cdots & \langle 1|A|N\rangle \\ \langle 2|A|1\rangle & \cdots & \langle 2|A|N\rangle \\ \vdots & & \\ \langle N|A|1\rangle & \cdots & \langle N|A|N\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1|u\rangle \\ \langle 2|u\rangle \\ \vdots \\ \langle N|u\rangle \end{pmatrix} \quad : \text{ comparar Eq. (6.3)}$$

notar: $Q_{mn} = \langle m|Q|n\rangle = q_n \langle m|n\rangle = q_n \delta_{m,n}$: matriz diagonal :
: representação observável Q na representação Q;

de fato, se operador $F = F(Q)$: $F_{mn} = \langle m|F(Q)|n\rangle$
$= F(q_n)\,\delta_{mn}$;

além disso, se operador A é tal que $[A, Q] = 0$
↳ op A na representação Q : matriz diagonal

notar: $[A, Q] = 0 \rightarrow \langle m|AQ - QA|n\rangle = (q_m - q_n)\langle m|A|n\rangle = 0$;
se $n \neq m \rightarrow A_{mn} = 0$.

Ex. 1 : traço operador A.
na representação Q, temos que
$\mathrm{Tr}\,A = \sum_n \langle n|A|n\rangle = \sum_n A_{nn}$

em particular, Eq. (38.2) :

$$\mathrm{Tr}(AB) = \sum_n \langle n|AB|n\rangle = \sum_n \langle n|A P_Q B|n\rangle =$$

$$= \sum_{mn} \langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle = \sum_{mn} \langle m|B|n\rangle\langle n|A|m\rangle$$

$$= \sum_m \langle m|B\Big(\sum_n |n\rangle\langle n|\Big)A|m\rangle = \sum_m \langle m|BA|m\rangle$$

$$= \mathrm{Tr}(BA)$$

Ex. 2 : operador $O = |u\rangle\langle v|$,
na representação Q, temos que

$O_{mn} = \langle m|u\rangle\langle v|n\rangle$

em forma matricial :

$$\begin{pmatrix} \langle 1|u\rangle \\ \langle 2|u\rangle \\ \vdots \\ \langle N|u\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle v|1\rangle & \langle v|2\rangle & \ldots & \langle v|N\rangle \end{pmatrix} \quad : \text{matriz } \square \; : \text{comparar Eq. (42.1)} \qquad (44.1)$$

Exercício: mostrar que $Tr(|u\rangle\langle v|) = \langle v|u\rangle$.

· Transformação de matrizes,

considerar matrizes $A_{N\times N}$, $N < +\infty$ e

$T_{N\times N}$, matriz não-singular : $\det T \neq 0$

podemos definir: $A' = TAT^{-1}$ (44.2)

↳ $T^{-1}A'T = T^{-1}(TAT^{-1})T = A$

Eq. (44.2) : matriz T define a transformação $A \to A'$: correspondência one-to-one

· propriedades : a transformação T preserva :

(i) traço :

$Tr A' = Tr(TAT^{-1}) = Tr(T^{-1}TA) = Tr A$

(ii) determinante :

$\det A' = \det(TAT^{-1}) = \det T \cdot \det A \cdot \det T^{-1} = \det A$ (44.3)

(iii) operações algébricas entre matrizes

e.g., se $A = \lambda BC + D$; $\lambda \in \mathbb{C}$

↳ $TAT^{-1} = \lambda TB\underbrace{T^{-1}T}_{1}CT^{-1} + TDT^{-1} \to A' = \lambda B'C' + D'$

similar p/ vetores, podemos definir:

$u' = Tu$ e $u = T^{-1}u'$: u vetor coluna

(45.1)

$v' = vT^{-1}$ e $v = v'T$: v " linha

novamente: transformação T preserva ops. algébricas entre vetores e matrizes $\square$.

· conjugação: em geral, não é preservada pela transf. T; vamos determinar condição p/ transf. T preservar a conjugação.

se $A' = TAT^{-1} \xrightarrow{\text{Eq. (44.2)}} A'^{+} = TA^{+}T^{-1}$

por outro lado,

$$A'^{+} = (A')^{+} = (TAT^{-1})^{+} = \underbrace{(T^{-1})^{+}A^{+}T^{+} \overset{\text{CONDIÇÃO I}}{=} TA^{+}T^{-1}}_{(*)}$$

↳ $T^{+}(*)T$: $T^{+}(T^{-1})^{+}A^{+}T^{+}T = T^{+}TA^{+}T^{-1}T$

↳ $A^{+}T^{+}T = T^{+}TA$ $\rightarrow$ $[A, T^{+}T] = 0$

como $T^{+}T$ deve comutar com $\forall A_{N\times N} \xrightarrow{\text{Eq. (38.3)}} T^{+}T = \lambda I$; $\lambda \in \mathbb{C}$

a cte λ pode ser determinada considerando:

$\underbrace{u' = Tu}$ $\xrightarrow{\text{Eq. (45.1)}}$ $u'^{+} = u^{+}T^{-1}$

↳ $u'^{+} = u^{+}T^{+} = u^{+}T^{-1}$ $\rightarrow$ $u^{+}T^{+}T = u$ $\rightarrow$ $T^{+}T = 1$, pois u é arbitrário

CONDIÇÃO II

↳ $\lambda = 1$ ou matriz de transf. T: unitária definição : transformação unitária : transformação cuja matriz U correspondente é unitária, i.e., $U^{-1} = U^{+}$

notar : transf. unitária preserva : $\mathrm{Tr}\, A$, $\det A$, ops. algébricas e conjugação !

nesse caso, Eqs. (44.2) e (45.1) podem ser escritas como:

$$A' = U A U^{+} \qquad u' = U u \qquad v' = v U^{+} \qquad (46.1)$$
$$A = U^{+} A' U \qquad u = U^{+} u' \qquad v = v' U$$

· é possível verificar que:

(i) se A matriz hermitiana -> A pode ser diagonalizada por uma transf. unitária

(ii) se $[A, B] = 0$ -> matrizes A e B podem ser diagonalizadas pela mesma transf. unitária.

Obs. : os resultados acima obtidos p/ matrizes ordem $N < +\infty$ podem, em princípio, serem estendidos p/ $N \to +\infty$.

· Mudança de representação / base.

considerar 2 bases p/ espaço vetorial $\mathcal{E}$:

$|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_N\rangle$ e $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_N\rangle$

temos que:

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij} \qquad \sum_{i=1}^{N} |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = 1$$
$$(46.2)$$
$$\langle \varphi_k | \varphi_\ell \rangle = \delta_{k\ell} \qquad \sum_{k=1}^{N} |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k| = 1$$

como $|\varphi_k\rangle \in \mathcal{E}$, podemos escrever

$$|\varphi_k\rangle = \sum_i |\psi_i\rangle S_{ik} \quad ; \quad S_{ik} \in \mathbb{C} \qquad (47.1)$$

Eq. (46.2): $|\varphi_k\rangle = 1|\varphi_k\rangle = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\varphi_k\rangle$

↳ $S_{ik} = \langle\psi_i|\varphi_k\rangle$: elemento da matriz de transformação S

notar:

- $\sum_i S^*_{ik} S_{il} = \sum_i S^\dagger_{ki} S_{il} = \sum_i \langle\varphi_k|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\varphi_l\rangle$

$= \langle\varphi_k|\varphi_l\rangle = \delta_{k,l}$

- $\sum_k S_{ik} S^*_{jk} = \sum_k S_{ik} S^\dagger_{kj} = \sum_k \langle\psi_i|\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|\psi_j\rangle$

$= \langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{i,j}$

ou, em forma matricial:

$$S^\dagger S = S S^\dagger = 1 \quad : \quad S \text{ é uma matriz unitária} \qquad (47.2)$$

↳ S define uma transf. unitária

considerar vetor $|u\rangle \in \mathcal{E}$; temos que:

$|u\rangle = \sum_i u_i |\psi_i\rangle$: expansão vetor $|u\rangle$ base $|\psi_i\rangle$

(47.3)

$|u\rangle = \sum_k \bar{u}_k |\varphi_k\rangle$: " " " " $|\varphi_k\rangle$

↳ Q.: Qual a relação entre coeficientes u_i e $\bar{u}_k$?

notar: $|u\rangle = \sum_k \bar{u}_k |\varphi_k\rangle \overset{\text{Eq. (47.1)}}{=} \sum_k \bar{u}_k \sum_i |\psi_i\rangle S_{ik}$

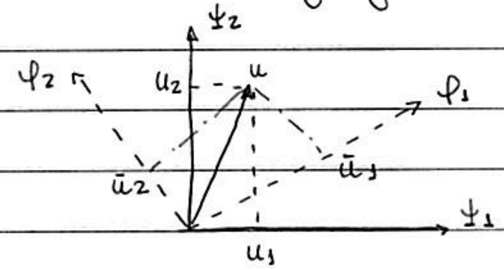
$= \sum_i \sum_k S_{ik} \bar{u}_k |\psi_i\rangle = \sum_i u_i |\psi_i\rangle$

↳ $u_i = \sum_k S_{ik}\, \bar{u}_k$ (48.1)

ou, em notação matricial:

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \dots & S_{1N} \\ S_{21} & S_{22} & \dots & S_{2N} \\ \vdots & & & \vdots \\ S_{N1} & S_{N2} & \dots & S_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{u}_1 \\ \bar{u}_2 \\ \vdots \\ \bar{u}_N \end{pmatrix}$$

Obs.: (1) análogo geométrico Eq. (48.1):



: transf. "passiva": vetor fixo
eixos rotação

(2) Comparando Eqs. (45.1) e (48.1) podemos identificar $T = S$;
Messiah: $T = S^+$

· produto escalar: considerar $|v\rangle \in \mathcal{E}$ tal que

$$|v\rangle = \sum_j v_j\, |\psi_j\rangle \quad e \quad |v\rangle = \sum_\ell \bar{v}_\ell\, |\varphi_\ell\rangle \qquad (48.2)$$

↳ Eqs. (47.3) e (48.2):

$$\langle u|v\rangle = \sum_{ij} u_i^* v_j \langle \psi_i|\psi_j\rangle = \sum_i u_i^* v_i = \sum_{k\ell} \sum_i S_{ik}^* \bar{u}_k^* S_{i\ell} \bar{v}_\ell$$

$$= \sum_{k\ell} \underbrace{\sum_i S_{ik}^* S_{i\ell}}_{\delta_{k\ell}} \bar{u}_k^* \bar{v}_\ell = \sum_k \bar{u}_k^* \bar{v}_k : \qquad (48.3)$$

: produto escalar invariante sob mudança base/
representação!

· considerar operador A associado ao espaço vetorial $\mathcal{E}$; temos que

$$A_{ij} = \langle \psi_i | A | \psi_j \rangle \ : \text{elemento matriz } A \text{ representação } |\psi_i\rangle$$

(49.1)

$$\bar{A}_{kl} = \langle \varphi_k | A | \varphi_l \rangle \ : \quad \text{"} \quad \text{"} \quad \text{"} \quad \text{"} \quad |\varphi_k\rangle$$

Eq. (46.2)

$$\hookrightarrow A_{ij} = \langle \psi_i | 1 A 1 | \psi_j \rangle = \sum_{kl} \langle \psi_i | \varphi_k \rangle \langle \varphi_k | A | \varphi_l \rangle \langle \varphi_l | \psi_j \rangle$$

$$= \sum_{kl} S_{ik} \bar{A}_{kl} S^*_{jl} = \sum_{kl} S_{ik} \bar{A}_{kl} S^\dagger_{lj}$$

em notação matricial: $\quad A = S \bar{A} S^\dagger$ (49.2)

Obs.: Eqs. (44.2) e (49.2) ok c/ a identificação $S = T$!

· verifica-se que $\operatorname{Tr} A$: independe base/representação.

· sobre o problema de autovalores,

considerar operador linear A tal que

$$A|u\rangle = a|u\rangle \tag{49.3}$$

Eq. (46.2)

$$\hookrightarrow A \cdot 1 |u\rangle = \sum_j A |\psi_j\rangle \langle \psi_j | u \rangle = a|u\rangle \tag{49.4}$$

$\langle \psi_i |$ (49.4) : $\quad \displaystyle\sum_j \langle \psi_i | A | \psi_j \rangle \langle \psi_j | u \rangle = a \langle \psi_i | u \rangle = \sum_j \delta_{ij}\, a \langle \psi_j | u \rangle$

$$\hookrightarrow \sum_j \left(A_{ij} - a\,\delta_{ij} \right) u_j = 0 \quad ; \quad i = 1, 2, \ldots, N$$

a equação acima possui solução não-trivial se

$$\det (A - a 1) = 0 \ : \text{eq. característica / secular } (39.2)$$

considerar Eq. (49.4) + $a \to a_k$ e $|u\rangle \to |u_k\rangle$:

$$\sum_j A|\psi_j\rangle\langle\psi_j|u_k\rangle = a_k|u_k\rangle$$

$\langle\psi_i|$ * : $\sum_j \langle\psi_i|A|\psi_j\rangle\langle\psi_j|u_k\rangle = a_k\langle\psi_i|u_k\rangle$

$\sum_i \langle u_l|\psi_i\rangle$ * : $\sum_{ij} \langle u_l|\psi_i\rangle\langle\psi_i|A|\psi_j\rangle\langle\psi_j|u_k\rangle = \sum_i a_k\langle u_l|\psi_i\rangle\langle\psi_i|u_k\rangle$

$= a_k\langle u_k|u_l\rangle = a_k\delta_{kl}$

Como :: $\langle u_k|A|u_l\rangle = a_l\langle u_k|u_l\rangle = a_k\delta_{kl} = \bar{A}_{kl}$

e considerando $S_{jk} = \langle\psi_j|u_k\rangle$

↳ $\sum_{ij} S^*_{il} A_{ij} S_{jk} = \bar{A}_{kl}$

↳ $\bar{A} = S^+ A S$: diagonalização operador A (transf. unitária) ~ transformação da base $|\psi_i\rangle$ (A não diagonal) p/ base $|u_i\rangle$ (A diagonal) (50.1)

: veja pg. 46 !

notar : $S_{jk} = \langle\psi_j|u_k\rangle$: colunas matriz de transf. S =
= componentes autovetores $|u_k\rangle$ na "base inicial" $|\psi_i\rangle$!

· Transformações unitárias II.

ideia : ≠ Sec. anterior, vamos considerar uma transf. unitária como uma transf. "ativa".

considerar : $|u\rangle$ e $|\bar{u}\rangle \in \mathcal{E}$;
A e $\bar{A}$ operadores ~ espaço $\mathcal{E}$ e operador unitário U tal que

$$|\bar{u}\rangle = U|u\rangle \quad \text{e} \quad \bar{A} = UAU^+ \qquad (50.2)$$

· transf. unitária U preserva o produto escalar:

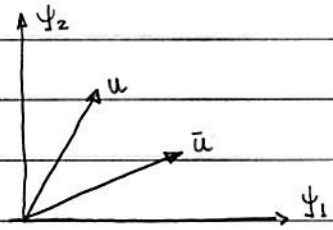
se $|v\rangle$ e $|\bar{v}\rangle \in \mathcal{E}$ tal que $|\bar{v}\rangle = U|v\rangle$, temos que

- $\langle \bar{u}|\bar{v}\rangle = \langle u|U^{+}U|v\rangle = \langle u|v\rangle$,

em particular, $\langle \bar{u}|\bar{u}\rangle = \langle u|u\rangle$: transf. unitária U preserva norma $|u\rangle$

- $\langle \bar{u}|\bar{A}|\bar{v}\rangle = \langle u|U^{+}(UAU^{+})U|v\rangle = \langle u|A|v\rangle$

Obs.: (1) análogo geométrico Eq. (50.2):



: transf. "ativa": vetor rotação eixos fixos

: comparar pg. 48

(2) comparando Eqs. (48.1), (49.2) e (50.2), podemos identificar $S^{+} \leftrightarrow U$!

· se U e V: transf. unitárias

↳ $W = UV$: " "

notar: $WW^{+} = (UV)(UV)^{+} = UVV^{+}U^{+} = UU^{+} = 1$

$W^{+}W = (UV)^{+}(UV) = V^{+}U^{+}UV = V^{+}V = 1$

· considerar: transf. unitária infinitesimal:

$$U = 1 - i\varepsilon F + O(\varepsilon^2); \quad \varepsilon \in \mathbb{R}, \ |\varepsilon| \ll 1, \ F: \text{op. linear} \quad (51.1)$$

vamos determinar condição op. F tal que op. U unitário

$U^{+}U = 1 \rightarrow (1 + i\varepsilon F^{+})(1 - i\varepsilon F) = 1 - i\varepsilon(F - F^{+}) + O(\varepsilon^2) = 1$

↳ se $F = F^{+}$ (ordem ε^1) → op. U é op. unitário considerar N transf. unitárias infinitesimais U c/ $\varepsilon = \theta/N$:

$$U = \left(1 - i\frac{\theta}{N}F\right)^N \xrightarrow[N\to+\infty]{} U(\theta) = e^{-i\theta F} \qquad (52.1)$$

Eq. (52.1): op. hermitiano F: gerador da transf. (de simetria) U

· Vamos verificar (36.1), parte (i) (p/ detalhes veja Sec. II.D, Cohen),

- inicial: se observáveis A e B são tais que $[A,B] = 0$ e

$$A|u_1\rangle = a_1|u_1\rangle$$
$$A|u_2\rangle = a_2|u_2\rangle, \; a_1 \neq a_2 \; \rightarrow \; \langle u_1|B|u_2\rangle = 0 \qquad (52.2)$$

notar: $[A,B] = 0 \rightarrow \langle u_1|AB - BA|u_2\rangle = 0$

$$(a_1 - a_2)\langle u_1|B|u_2\rangle = 0$$

$\hookrightarrow \langle u_1|B|u_2\rangle = 0$ pois $a_1 \neq a_2$.

- considerar observável A: $A|u_{n,i}\rangle = a_n|u_{n,i}\rangle$, $n = 1, 2, \ldots$

$i = 1, 2, \ldots, g_n$

como $[A,B] = 0 \xrightarrow{\text{Eq. (52.2)}} \langle u_{n,i}|B|u_{m,j}\rangle = 0$ p/ $n \neq m$:

: matriz que representa op. B na representação A é bloco diagonal!

graficamente:

$$\begin{array}{c} \varepsilon_1 \quad \varepsilon_2 \quad \varepsilon_3 \;\cdots \\ \begin{pmatrix} \boxed{//} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \boxed{//} & 0 & \\ 0 & 0 & \boxed{//} & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \end{array}$$

2 casos:

(i) se a_n não-degenerado $\rightarrow |u_{n,i}\rangle \rightarrow |u_n\rangle$: autovetor B

(ii) a_n degenerado,

vetores $|u_{n,i}\rangle$, $i = 1, 2, \ldots, g_n = \dim \mathcal{E}_n$: base p/ subespaço $\mathcal{E}_n$ associado autovalor a_n;

$B_{ij} = \langle u_{n,i} | B | u_{n,j} \rangle$: elementos matriz que representa op. B no subespaço $\mathcal{E}_n$; base $|u_{n,i}\rangle$; em geral, matriz não diagonal

entretanto, B_{ij} pode ser diagonalizada através transf. unitária S;

se $|v_{n,j}\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} |u_{n,i}\rangle S_{ij} = \sum_{i=1}^{g_n} |u_{n,i}\rangle\langle u_{n,i} | v_{n,j}\rangle$: Eq. (47.1)

tal que (condição) $B|v_{n,j}\rangle = b_{n,j}|v_{n,j}\rangle$

↳ vetores $|v_{n,j}\rangle$: autovetores observáveis A e B !