79b

REPRESENTAÇÃO

VAMOS TRABALHAR numa BASE DISCRETA

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

A EXPANSÃO DA FUNÇÃO $|\psi\rangle$,

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

~~RELAÇÃO COMPLETEZA~~

~~ESCREV~~ SUBSTITUINDO OS COEFICIENTES

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

MUDANDO O PRODUTO, USANDO ASSOCIATIVIDADE

$$|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\left(\langle u_i|\psi\rangle\right) = \sum_i \left(|u_i\rangle\langle u_i|\right)|\psi\rangle$$

MUDAMOS OS PARÊNTESES

PORTANTO

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

ESTA EQUAÇÃO SÓ TEM SENTIDO SE, ~~$\sum |u_i\rangle\langle u_i| = 1$~~

VAMOS DEFINIR O UM OPERADOR PROJETOR

~~PROJETOR DO VETOR u_i~~

$$P_{u_i} = |u_i\rangle\langle u_i|$$

$$P_{u_i} = |u_i\rangle\langle u_i|$$

ENTÃO A EQ SÓ TEM SENTIDO SE

$$\boxed{\sum P_{u_i} = I}$$

$$P_{u_i}|u_j\rangle = |u_i\rangle\underbrace{\langle u_i|u_j\rangle}_{\delta_{ij}} = 0 \quad j \neq i$$

ESTA EQUAÇÃO IMPLICA QUE SE SOMAMOS SOBRE TODAS AS PROJEÇÕES PREENCHEMOS O ESPAÇO TODO.

ISTO É CHAMADO RELAÇÃO DE COMPLETEZA.

$$P_{u_i}^2 = P_{u_i}P_{u_i} = |u_i\rangle\underbrace{\langle u_i|u_i\rangle}_{1}\langle u_i| = |u_i\rangle\langle u_i|$$

FORMAS MATRICIAIS

89

REPRESENTAÇÃO DE KETS

NA BASE $|u_i\rangle$, O ESTADO $|\psi\rangle$ É DADO

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

PODEMOS ~~ESCREVER~~ REPRESENTAR

REPRESENTAÇÃO DE KETS

VETOR COLUNA

$$\begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle u_n|\psi\rangle \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} \vdots \\ \langle w_\alpha|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

BASE DISCRETA — BASE CONTÍNUA

REPRESENTAÇÃO DE BRAS

$$\langle\varphi| = \langle\varphi|1 = \langle\varphi|\sum_i P_{u_i} = \sum_i \underline{\langle\varphi|u_i\rangle}\langle u_i|$$

$$= \langle u_i|\varphi\rangle^* \langle u_i|$$

b_i CORRESPONDE AO KET $|\varphi\rangle$ ENTÃO $\langle u_i|\varphi\rangle^* = b_i^*$,

PODEMOS REPRESENTAR COMO UM VETOR COLUNA

$(\langle\varphi|u_1\rangle \ldots \langle\varphi|u_i\rangle)$

REPRESENTAÇÃO BRAS

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|1|\psi\rangle = \langle\varphi|P_{u_i}|\psi\rangle$$

$$= \sum_i \langle\varphi|u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle = \sum_i b_i^* c_i$$

O PRODUTO ESCALAR

(87)

$\langle \varphi | \psi \rangle = \sum b_i^* c_i$

SE O KET $|\psi\rangle$,

$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \langle u_i | \psi \\ \\ \\ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$

ENTÃO O PRODUTO ESCALAR É

$(\langle \varphi | u_1 \quad \langle \varphi | u_i | \ \cdots) \begin{pmatrix} \\ \\ \\ \end{pmatrix}$ = NÚMERO!!

REPRESENTAÇÃO ~~...~~ OPERADORES

$A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle = \begin{pmatrix} \\ \\ \\ \end{pmatrix}$

FORMA MATRICIAL

TRANSFORMAÇÃO DE KET $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$

$c_i' = \langle u_i | \psi' \rangle = \langle u_i | A | \psi \rangle = \underbrace{\langle u_i | A | u_j \rangle}_{A_{ij}} \langle u_j | \psi \rangle$

$A_{ij} \langle u_j | \psi \rangle$

$\begin{pmatrix} \\ \\ \\ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \\ \\ \\ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \\ \\ \\ \end{pmatrix}$

85

REPRESENTAÇÃO DA QUANTIONE

$$\langle \varphi | A | \psi \rangle = \langle \varphi | \sum_i u_i \rangle \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle$$

$$\langle \varphi | u_i \rangle \; A_{ij} \; \langle u_j | \psi \rangle$$

$$b_i^* \, A_{ij} \, c_j$$

$$\langle \varphi | A | \psi \rangle = \begin{pmatrix} b_1^* & \cdots & b_i^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} A_{12} \cdots \\ \\ \\ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \end{pmatrix}$$

REP.

ADJUNTO DE UM OPERADOR A

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

ENTÃO A MATRIZ $(A^\dagger)_{ij}$ É CONJUGADO HERMITICO DE A_{ji}

$$(A^\dagger)_{ij} = (A_{ij})^{T*}$$

$$\boxed{A^\dagger = (A^T)^*}$$

SE O ~~MATRIZ~~ OPERADOR A É HERMITICA, ENTÃO

$$(A^\dagger)_{ij} = A_{ij}^* = A_{ji}^* = (A_{ij})^{T*}$$

A REPRESENTAÇÃO DE UM OPERADOR HERMITIANO (87)

$$A_{ij} = (A_{ji})^{T*}$$

NO CASO ELEMENTOS DA DIAGONAL

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ A_{21} & \cdots & & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* & A_{31}^* & \cdots \\ A_{12}^* & \cdots & \cdots & \\ A_{13}^* & \cdots & \cdots & \\ \vdots & \cdots & \cdots & \end{pmatrix}$$

ENTÃO $A_{11} = A_{11}^*$, $A_{22} = A_{22}^*$ $\longrightarrow$ $A_{ii} = A_{ii}^*$

OS ELEMENTOS DA DIAGONAL PRINCIPAL SÃO REAIS.

MUDANÇA DE REPRESENTAÇÃO,

EXERCÍCIO DA LISTA

EQUAÇÃO DE AUTOVALORES.

~~VAMOS DEFINIR~~

SEJA UM OPERADOR LINEAR A, UM KET $|\psi\rangle$ É DITO ~~REPRESENTAR~~ SER UM AUTOVETOR SE

$$\boxed{A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle}$$

RELEMBRE O CASO DO POÇO INFINITO

$$\boxed{H\,\psi(x,y,z) = E\,\psi(x,y,z)}$$

E ESTA É A EQUAÇÃO DE AUTOVALORES DO OPERADOR A, E NO CASO DE $\lambda = \lambda_i$ CHAMAMOS DE AUTOVALORES.

OS AUTOVALORES λ SÃO DITOS NÃO-DEGENERADOS, CASO CONTRÁRIO SÃO DITOS DEGENERADOS. E NO CASO GERAL COM GRAU DEGENERESCÊNCIA g,

$$A|\psi_i\rangle = \lambda|\psi_i\rangle \quad i = 1 \ldots g$$

ENCONTRAR OS AUTOVALORES E AUTOVETORES DE A

Porque escrevo o operador A como 91

$$\langle \psi_i | A | \psi \rangle = \lambda \underbrace{\langle \psi_i | \psi \rangle}_{c_i}$$

$$\langle \psi_i | A \sum_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j| \psi\rangle = \sum_j \underbrace{\langle \psi_i | A | \psi_j\rangle}_{A_{ij}} \underbrace{\langle \psi_j | \psi \rangle}_{c_j}$$

Então em forma matricial

$$\boxed{A_{ij} c_j = \lambda c_i} \Rightarrow \boxed{A_{ij} c_j - \lambda c_i = 0}$$

Num formato matricial

$$\begin{pmatrix} \\ \\ \\ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \\ \\ \\ \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \\ \\ \\ \end{pmatrix}$$

coluna

Matriz

Os autovalores são encontrados pelo determinante

$$\det \begin{vmatrix} A_{11} - \lambda & - & - \\ & A_{ij} - \lambda & \\ & & A_{3j} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

matriz $N \times N$

AUTOVETORES

(a) Assume λ_0 é um autovalor não-degenerado.

Então $\left| \quad \right|_{\lambda=\lambda_0} = 0$

Fornece $N-1$ equações, temos N incógnitas

Então temos $N-1$ equações não homogêneas,

Então temos uma variável independente.

Exemplo do Griffiths

EXEMPLO 1:

Griffiths 3.7 da 1ª edição

O operador $H = \begin{pmatrix} a & 0 & b \\ 0 & c & 0 \\ b & 0 & a \end{pmatrix}$ Assuma $c \neq a \pm b$,

Autovalores

$$\begin{pmatrix} a-\lambda & 0 & b \\ 0 & c-\lambda & 0 \\ b & 0 & a-\lambda \end{pmatrix} = 0$$

$$(a-\lambda)\left[(c-\lambda)(a-\lambda)\right] - b^2(c-\lambda) = 0$$

$$(c-\lambda)\left[(a-\lambda)^2 - b^2\right] = 0$$

$$(\lambda-a)^2 = \pm b$$

$$\lambda = a \pm b$$

$\lambda_1 = c$

$\lambda_{2,3} = a \pm b$

Com esta condição os autovalores não são degenerados

95

AUTOVETTORI

$$\begin{pmatrix} a & 0 & b \\ 0 & c & 0 \\ b & 0 & a \end{pmatrix}\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix}$$

• $\lambda = c$

$$a d_1 + b d_3 = c d_1 \qquad d_3 = \frac{(c-a)\,d_1}{b}$$

$$c d_2 = c d_2 \quad \forall d_2$$

$$b d_1 + a d_3 = c d_3 \qquad d_3 (c-a) + b d_1 = 0$$

$$d_3 = \frac{-b d_1}{(c-a)} = \frac{(c-a) d_1}{b}$$

TIPO $e_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ → [illegible]

ESCLUSI INCERTEZZE

• $\lambda = a \pm b$

$$a d_1 + b d_3 = (a \pm b) d_1 \qquad b d_3 = (a \pm b - a) d_1 = \pm b d_1 \qquad d_1 = d_3 = 0$$

$$d_1 = \pm d_3$$

$$c d_2 = (a \pm b)\, d_2 \rightarrow d_2 = 0$$

$$b d_1 + a d_3 = (a \pm b) d_3 \qquad b d_1 = (a \pm b - a) d_3 = \pm b d_3$$

$$d_1 = \pm d_3$$

$$\cancel{d_3 = \frac{(a \pm b - a) d_1}{b}} = \cancel{\pm b d_1 \pm d_3}$$

IDENTICI

$$\cancel{d_3 = \frac{(a \pm b - b)\, d_1}{a}}$$

PORTANTO

$$e_2 = \begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix} \qquad e_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix} \qquad e_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}$$

SÃO AUTOVETORES VD. EXEMPLO 2:

GRIFFITHS 3.37 2ª EDIÇÃO

$$H = \hbar\omega\begin{pmatrix}1&0&0\\0&2&0\\0&0&2\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&2&0\\0&0&2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}d_1\\d_2\\d_3\end{pmatrix} = 2\begin{pmatrix}d_1\\d_2\\d_3\end{pmatrix}$$

$d_1 = 2d_1$ $\quad d_1 = 0$

$2d_2 = 2d_2 + d_2$

$2d_3 = 2d_3 + d_3$

$$\begin{pmatrix}0\\d_2\\d_3\end{pmatrix}$$

NORMALIZADO

$d_2^2 + d_3^2 = 1$

AUTOVALORES DEGENERADOS: $\begin{pmatrix}d_2 = 1\\ d_3 = 0\end{pmatrix}$

$d_1' + 0 = 0 \qquad d_1' = 0$

$$\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix}0\\d_2'\\d_3'\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

97

97a

AUTOESTADOS DO HAMILTONIANO

$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ $|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$

HAMILTONIANO

$$H = \begin{pmatrix} a & 0 & b \\ 0 & c & 0 \\ b & 0 & a \end{pmatrix} \qquad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ +1 \end{pmatrix} \quad |3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$\lambda_1 = c$

$\lambda_{3,2} = a \pm b$

SE O ESTADO INICIAL É

$$|\psi(t=0)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |1\rangle$$

COMO EVOLUI ?

$$\boxed{|\psi_n\rangle = |\psi(t=0)\rangle e^{-iE_n t/\hbar}}$$

$$|\psi(t)\rangle = |1\rangle e^{-iE_1 t/\hbar} = e^{ict/\hbar} |1\rangle$$

É UM ESTADO ESTACIONÁRIO

SE O ESTADO INICIAL É

$$\boxed{|\psi(t=0)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \sum c_n |n\rangle = c_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} + c_3 \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}}$$

NESTE CASO

AUTO-ADJUNTO / HERMITIANO SÃO CONCEITOS SEPARADOS.

HERMITIANO $\rightarrow$ $A^{\dagger} = A$ OU $\langle \varphi | A^{\dagger} | \psi \rangle = \langle \varphi | A | \psi \rangle = \langle \varphi | A | \psi \rangle$

AUTO-ADJUNTO $\rightarrow$ TEM O MESMO INTERVALO DE VARIÁVEL OS OPERADORES A e $A^{\dagger}$.

COMO ACHAR OS COEFICIENTES

PARA ACHAR C_1

$$(0\ 1\ 0)\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} = (0\,1\,0)\, C_1 \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} + (0\,1\,0)\, C_2 \begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\0\\1/\sqrt{2}\end{pmatrix} + (0\,1\,0)\, C_3 \begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\0\\-1/\sqrt{2}\end{pmatrix}$$

ACHAMOS $C_1 = 0$ $C_2 = -C_3 = 1/\sqrt{2}$

$$\boxed{C_n = \langle n | \psi(t=0) \rangle}$$

$E_2 = a+b$

$E_3 = a-b$

ENTÃO $|\psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |2\rangle - |3\rangle \right\}$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ e^{-iE_2 t/\hbar} |2\rangle - e^{-iE_3 t/\hbar} |3\rangle \right\}$$ NÃO É UM ESTADO ESTACIONÁRIO

AUTOVALORES DEGENERADOS

USO DA GRAM-SCHMIDT ORTOGONALIZAÇÃO.

PROBLEMA A.4 DO GRIFFITHS

PROPRIEDADES DE OPERADORES HERMITIANOS

SE CONSIDERARMOS OPERADORES HERMITIANOS $A^\dagger = A$.

PROPRIEDADES DE OPERADORES HERMITIANOS.

(i) OS AUTOVALORES SÃO REAIS.

$\cancel{\langle\psi|A|\psi\rangle = A\langle}$ $\quad A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|\lambda|\psi\rangle = \lambda\langle\psi|\psi\rangle$$

SABEMOS QUE $\langle\psi|A|\psi\rangle \in$ REAL, PORTANTO $\lambda \in$ REAL.

$$\langle\psi|A|\psi\rangle^* = \langle\psi|A^\dagger\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

REAL

101

(ii) Os autovetores de um operador hermitiano são ortogonal.

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \quad (1) \qquad A^\dagger = A$$

$$A|\varphi\rangle = \mu|\varphi\rangle \quad (2)$$

$$\langle\psi|A^\dagger = \langle\psi|A = \langle\psi|\lambda^* = \langle\psi|\lambda$$

$$\langle\varphi|A^\dagger = \langle\varphi|A = \langle\varphi|\mu^* = \langle\varphi|\mu \quad (3)$$

~~Hermitiano~~ $\cancel{|\varphi\rangle}$

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \text{ de (1) } \langle\varphi|$$

$$\langle\varphi|A = \langle\varphi|\mu \text{ de (3) } |\psi\rangle$$

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\varphi|\lambda|\psi\rangle$$

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\varphi|\mu|\psi\rangle$$

Subtraindo termos,

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle - \langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\varphi|(\lambda-\mu)|\psi\rangle = 0$$

Se $\lambda \neq \mu$ por hipótese então

$$\boxed{\langle\varphi|\psi\rangle = 0}$$

são ortogonais.

(iii) ~~OP~~ DECOMPOSIÇÃO ESPECTRAL DO OPERADOR NORMAL

A,

$$A|\psi_i\rangle = \lambda_i|\psi_i\rangle$$

$$\langle\psi_j|A|\psi_i\rangle = \langle\psi_j|\lambda_i|\psi_i\rangle = \lambda_i\delta_{ij}$$

OPERADOR NORMAL

$$A = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|A$$

$$\langle\psi_i|A = \langle\psi_i|\lambda_i$$

$$\boxed{A = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\lambda_i}$$

RESUMO: OPERADORES NORMAIS

(i) AUTOVALORES REAIS

(ii) AUTOVETORES SÃO ORTOGONAIS

(iii) O OPERADOR COBRE TODOS VETORES DA BASE E É DIAGONALIZÁVEL.