Representações no espaço de estados

- **Representação matricial do ket** $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$

A questão é $\begin{cases}\text{Conhecendo as componentes de } |\psi\rangle \text{ em uma dada representação,}\\ \text{como calcular as componentes de } |\psi'\rangle \text{ na mesma representação?}\end{cases}$

As componentes c_i' de $|\psi'\rangle$ são dadas por $c_i' = \langle u_i|\psi'\rangle = \langle u_i|A|\psi\rangle = \langle u_i|A\mathbb{1}|\psi\rangle$

$$\therefore\ c_i' = \langle u_i|A(\sum_j |u_j\rangle\langle u_j|)|\psi\rangle = \sum_j \langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle = \sum_j A_{ij}c_j \text{ com } c_j = \langle u_i|\psi\rangle$$

Isso é apenas uma operação matricial, dada por:

$$\begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \\ \vdots \\ c_i' \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2j} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \dots & A_{ij} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Se a base fosse contínua, teríamos (faça em casa): $c'(\alpha) = \int d\alpha'\ A(\alpha, \alpha')c(\alpha')$,

que pode ser presentada por:

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ c'(\alpha) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots \\ \vdots & A(\alpha,\alpha') & \vdots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ c(\alpha') \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Representações no espaço de estados

- **Álgebra matricial para obter o número $\langle\varphi|A|\psi\rangle$ em uma base conhecida**

Se a base é discreta, $\{|u_i\rangle\}$ com $b_i = \langle u_i|\varphi\rangle$ e $c_j = \langle u_j|\psi\rangle$, teríamos:.

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\varphi|\mathbb{1}A\mathbb{1}|\psi\rangle = \langle\varphi|(\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|)A(\sum_j |u_j\rangle\langle u_j|)|\psi\rangle = \sum_{ij} b_i^\star A_{ij} c_j$$

Isso é apenas uma operação matricial, dada por:

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle \doteq \begin{pmatrix} b_1^\star & b_2^\star & \dots & b_i^\star & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2j} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \dots & A_{ij} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_j \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Se a base fosse contínua, $\{|w_\alpha\rangle\}$, com $b(\alpha) = \langle w_\alpha|\varphi\rangle$ e $c(\alpha') = \langle w_{\alpha'}|\psi\rangle$,

teríamos: $\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\varphi|\mathbb{1}A\mathbb{1}|\psi\rangle = \int\int d\alpha d\alpha'\ b^\star(\alpha)A(\alpha,\alpha')c(\alpha)$ que

pode ser presentada por:

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle \doteq \begin{pmatrix} \dots & b(\alpha)^\star & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots \\ \vdots & A(\alpha,\alpha') & \vdots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ c(\alpha') \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Comentários

- $\langle \varphi' | = \langle \varphi | A,$ onde $c_i = \langle u_i | \varphi' \rangle$ e $b_i = \langle u_i | \varphi \rangle$, é representado por uma matriz linha, dada por

$$\begin{pmatrix} c_1^\star & c_2^\star & \dots & c_i^\star & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1^\star & b_2^\star & \dots & b_i^\star & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2j} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \dots & A_{ij} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

- $(\langle \varphi | A) | \psi \rangle = \langle \varphi | (A | \psi \rangle) = \langle \varphi | A | \psi \rangle$ nada mais é que a propriedade associativa das matrizes: $(AB)C = A(BC) = ABC$.
- Como você calcularia $|\psi\rangle\langle\psi|$, sabendo todos os $c_i = \langle u_i | \psi \rangle$ na base $\{|u_i\rangle\}$? Que tal?

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^\star & c_2^\star & \dots & c_j^\star & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 c_1^\star & c_1 c_2^\star & \dots & c_1 c_j^\star & \dots \\ c_2 c_1^\star & c_2 c_2^\star & \dots & c_2 c_j^\star & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_i c_1^\star & c_i c_2^\star & \dots & c_i c_j^\star & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

Representação matricial do operador adjunto

- Estamos prontos para obter a representação matricial de $A^\dagger$, o operador adjunto de A.

  Sabemos que $\left(A^\dagger\right)_{ij} = \langle u_i|A^\dagger|u_j\rangle = \langle u_j|A|u_i\rangle^\star = A^\star_{ji}$ $\therefore$

$$\text{se } A \doteq \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2j} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \dots & A_{ij} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \Rightarrow A^\dagger \doteq \begin{pmatrix} A^\star_{11} & A^\star_{21} & \dots & A^\star_{j1} & \dots \\ A^\star_{12} & A^\star_{22} & \dots & A^\star_{j2} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A^\star_{1i} & A^\star_{2i} & \dots & A^\star_{ji} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

  De forma similar poderíamos escrever $A^\dagger$ em uma base contínua $\{|w_\alpha\rangle\}$

$$A^\dagger(\alpha,\alpha') = \langle w_\alpha|A^\dagger|w_{\alpha'}\rangle = \langle w_{\alpha'}|A|w_\alpha\rangle^\star = A^\star(\alpha',\alpha)$$

- Note que se A é Hermiteana, $A^\dagger = A$ e $\therefore \begin{cases} A_{ij} = A^\star_{ji} \rightarrow A_{ii} \text{ é real.} \\ \\ A(\alpha,\alpha') = A^\star(\alpha',\alpha) \rightarrow A(\alpha,\alpha) \text{ é real.} \end{cases}$

O operador adjunto de um operador é o complexo conjugado da matriz transposta. Se Hermiteano, a diagonal é real e $A_{ij} = A^\star_{ji}$.

Instituto de Física Gleb Wataghin

UNICAMP

E se cada um escolhesse uma base diferente?

- **Mudança de representação** *(nos preocuparemos com a discreta).*

$$\text{(base velha)}\quad \{|u_i\rangle\} \Longleftrightarrow \{|t_k\rangle\}\ \text{base nova)}$$

A matriz $S_{ik} = \langle u_i|t_k\rangle$ terá um papel importante, onde $\begin{cases} \langle u_i| \text{ é o bra da velha,} \\ |t_k\rangle \text{ é o ket da nova.} \end{cases}$

Por serem bases, vale $\begin{cases} P_{\{|u_i\rangle\}} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \mathbb{1} \\ P_{\{|t_k\rangle\}} = \sum_k |t_k\rangle\langle t_k| = \mathbb{1} \end{cases}$ com $\begin{cases} \langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij} \\ \langle t_k|t_\ell\rangle = \delta_{k\ell} \end{cases}$

- Note que $S^\dagger$ é tal que $\left(S^\dagger\right)_{ki} = \left(S_{ik}\right)^\star = \langle t_k|u_i\rangle$. Quanto vale $S^\dagger S$?

Um elemento desta matriz é dado por $\left(S^\dagger S\right)_{k\ell} = \sum\limits_i S^\dagger_{ki} S_{i\ell} = \sum\limits_i \langle t_k|u_i\rangle\langle u_i|t_\ell\rangle$

Mas isso pode ser reescrito por $\langle t_k|\underbrace{\Big(\sum\limits_i |u_i\rangle\langle u_i|\Big)}_{\mathbb{1}}|t_\ell\rangle = \langle t_k|t_\ell\rangle = \delta_{k\ell}$. O que

permite escrever $S^\dagger S = I$. De maneira análoga, podemos achar $SS^\dagger = I$.

Para isso, repita o raciocínio anterior,

$$\left(SS^\dagger\right)_{ij} = \sum_k S_{ik}S^\dagger_{kj} = \sum_k \langle u_i|t_k\rangle\langle t_k|u_j\rangle = \langle u_i|\underbrace{\Big(\sum_k |t_k\rangle\langle t_k|\Big)}_{\mathbb{1}}|u_j\rangle = \langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij}.$$

E se cada um escolhesse uma base diferente?

- **Transformação das componentes de um ket da base velha para a nova.**

$$\text{(temos os)} \;\; \langle u_i|\psi\rangle \Longleftrightarrow \text{(queremos os)} \; \langle t_k|\psi\rangle$$

A estratégia é similar: agora fazemos uso do operador unidade da base velha em: $\langle t_k|\psi\rangle$, isto é, $\langle t_k|\psi\rangle = \langle t_k|\mathbb{1}|\psi\rangle = \langle t_k|\big(\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\big)|\psi\rangle = \sum_i \underbrace{\langle t_k|u_i\rangle}_{(S^\dagger)_{ki}}\langle u_i|\psi\rangle$

E isso nos leva da base velha para a base nova: $\langle t_k|\psi\rangle = \sum_i (S^\dagger)_{ki}\langle u_i|\psi\rangle$

- A relação inversa (base nova para a base velha) é obtida por:

$$\langle u_i|\psi\rangle = \langle u_i|\mathbb{1}|\psi\rangle = \langle u_i|\big(\sum_k |t_k\rangle\langle t_k|\big)|\psi\rangle = \sum_k \underbrace{\langle u_i|t_k\rangle}\langle t_k|\psi\rangle = \sum_k S_{ik}\langle t_k|\psi\rangle$$

S_{ik} tem um papel importante.

- **Transformação das componentes de um bra da base velha para a nova.**

$$\text{(temos os)} \;\; \langle \psi|u_i\rangle \Longleftrightarrow \text{(queremos os)} \; \langle \psi|t_k\rangle$$

$$\langle \psi|t_k\rangle = \sum_i \langle\psi|u_i\rangle\langle u_i|t_k\rangle = \sum_i \langle\psi|u_i\rangle S_{ik}$$

- A relação inversa (base nova para a base velha):

$$\langle \psi|u_i\rangle = \sum_k \langle\psi|t_k\rangle\langle t_k|u_i\rangle = \sum_k \langle\psi|t_k\rangle (S^\dagger)_{ki}$$

E se cada um escolhesse uma base diferente?

- **Transformação dos elementos de matriz de um operador.**

$$\text{(temos os)}\quad \langle u_i|A|u_j\rangle \Longleftrightarrow \text{(queremos os)}\ \langle t_k|A|t_\ell\rangle$$

A estratégia é similar: fazemos uso do operador unidade da base velha em:

$$\langle t_k|A|t_\ell\rangle = \langle t_k|\mathbb{1}A\mathbb{1}|t_\ell\rangle = \sum_{ij}\langle t_k|u_i\rangle\langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|t_\ell\rangle = \sum_{ij}\left(S^\dagger\right)_{ki}A_{ij}S_{j\ell}$$

- ○ A relação inversa (base nova para a base velha) é obtida por:

$$\langle u_i|A|u_j\rangle = \langle u_i|\mathbb{1}A\mathbb{1}|u_j\rangle = \sum_{ij}\langle u_i|t_k\rangle\langle t_k|A|t_\ell\rangle\langle t_\ell|u_j\rangle = \sum_{k\ell}S_{ik}A_{k\ell}\left(S^\dagger\right)_{\ell j}$$

- **Um resumo rápido sobre o que aprendemos:**
  - Representar um ket (vetor estado) em uma base: $\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle$
  - Representar um bra (funcional linear) em uma base: $\sum_i \langle\psi|u_i\rangle\langle u_i|$
  - Representar um operador em uma base: $\langle u_i|A|u_j\rangle$
  - Representar o conjugado do operador em uma base: $\langle u_i|A^\dagger|u_j\rangle = \langle u_j|A|u_i\rangle^\star$
  - Mudar de representação (de uma base para outra), usando: S e $S^\dagger$.

Próximo passo: *aprender a construir bases.*

Construindo Bases

- **Equações de autovalor. Observáveis.**

◦ *Autovalores e autovetores de um operador.*

$$|\psi\rangle \begin{cases} \text{é dito um autovetor ou autoket de } A, \text{um operador linear, se} \\ \qquad\qquad\qquad A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle, \\ \text{onde } \lambda \text{ é um número complexo (chamado de autovalor de } A). \end{cases}$$

> *O conjunto de autovalores é chamado de espectro de A*

◦ *Comentários*

(1) Note que se $|\psi\rangle$ é um autovetor de A, com autovalor λ, $\alpha|\psi\rangle$ também é com o mesmo autovalor, pois $A(\alpha|\psi\rangle) = \alpha A|\psi\rangle = \alpha\lambda|\psi\rangle = \lambda(\alpha|\psi\rangle)$.

(2) Para tentar resolver essa ambiguidade, podemos exigir que $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Resolve? Note que $e^{i\theta}|\psi\rangle$ tem a mesma norma que $|\psi\rangle$. Está fase arbitrária não será problema, pois veremos que tanto $e^{i\theta}|\psi\rangle$ como $|\psi\rangle$ terão a mesma informação física e essa arbitrariedade poderá ser ignorada.

Construindo Bases

- Comentários (continuação) e terminologias sobre: $A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$.

  (3) λ é chamado não-degenerado, quando associado a este autovalor existe um único autovetor (todos os existentes são colineares).

  (4) Se existir pelo menos dois autovetores linearmente independentes (não colineares), correspondendo ao mesmo autovalor, este autovalor é chamado de "degenerado".

  (5) O grau de degenerescência é o número de autovetores linearmente independentes com o mesmo autovalor, isto é, se λ é g-degenerado, é porque existem g estados $|\psi^i\rangle$ $(i = 1...g),$ tal que $A|\psi^i\rangle = \lambda|\psi^i\rangle$.

  (6) Note que no caso de autovalor degenerado vale o princípio da superposição, isto é, o ket $|\psi\rangle = \sum_i^g c_i|\psi^i\rangle$ é um autovetor de A com autovalor $\lambda, \forall\ c_i$.

$$\{|\psi^i\rangle\} \Rightarrow \begin{cases} \textit{espaço vetorial g-dimensional entitulado} \\ \textit{auto-subespaço do autovalor } \lambda. \end{cases}$$

Construindo Bases

- Comentários (continuação) e terminologias sobre: $A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$.

(7) *Exemplo:* $P_\psi|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$ com $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$.

A solução para $|\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$ parece simples: $\begin{cases} \lambda = 1 \rightarrow |\varphi\rangle = |\psi\rangle \\ \lambda = 0 \rightarrow \forall|\varphi\rangle \text{ com } \langle\psi|\varphi\rangle = 0. \end{cases}$

Note que $\begin{cases} \lambda = 1 \rightarrow \text{autovalor não-degenerado} \\ \lambda = 0 \rightarrow \text{autovalor infinitamente degenerado.} \end{cases}$

(8) Se $A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \overset{\text{aplique } \dagger}{\Longrightarrow} \big(A|\psi\rangle\big)^\dagger = \big(\lambda|\psi\rangle\big)^\dagger \implies \langle\psi|A^\dagger = \lambda^\star\langle\psi|$.

Note que, a priori, nada pode ser dito sobre $\langle\psi|A$, a menos que $A^\dagger = A$.

- **Encontrando os autovalores e autovetores de um operador.**

Em palavras, dado A, como encontrar $\begin{cases} \lambda' s \\ |\psi\rangle' s \end{cases}$ que satisfaçam $A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$?

Primeiro espaços de dimensão finita. Depois generalizaremos!

Construindo Bases

- **Encontrando os autovalores e autovetores de um operador** (continuação).

Primeiro vamos escolher uma representação, por exemplo, $\{|u_i\rangle\}$, com $i=1,...,N$.

Sabendo que vale ortonormalidade e completeza para essa base $\begin{cases} \langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij} \\ \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \mathbb{1}, \end{cases}$

comece por projetar a equação em $|u_i\rangle$, isto é: $\langle u_i|A|\psi\rangle = \lambda\langle u_i|\psi\rangle$. Depois faça uso do operador unidade para obter: $\langle u_i|A\mathbb{1}|\psi\rangle = \sum_j \langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle = \lambda\langle u_i|\psi\rangle$.

Note que essa é uma equação que permite encontrar $\langle u_i|\psi\rangle = c_i$ e como já vimos anteriormente, se tivermos os c_i, é o mesmo que ter (uma representação de) $|\psi\rangle$. Os elementos da matriz $\langle u_i|A|u_j\rangle = A_{ij}$ definem o nível de acoplamentos entre os diferentes $c_i^\prime$s. Podemos reescrever a equação da seguinte maneira:

$$\sum_j A_{ij}c_j = \lambda c_i \Rightarrow \sum_j \left(A_{ij} - \lambda\delta_{ij}\right)c_j = 0$$

e reconhecer essa última como um sistema de equações lineares e homogêneas, onde as variáveis desconhecidas são os $c_j^\prime s$, as componentes do autovetor $|\psi\rangle$, na representação escolhida.

Na próxima aula discutiremos a estratégia para resolver esta equação