F 689 – Mecânica Quântica I

2º Semestre de 2022
12/09/2022
Aula 7

Aula passada

Base	Expansão	Componentes
$u_i(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i u_i(\mathbf{r})$	$c_i = (u_i, \psi)$
$v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3p\,\overline{\psi}(\mathbf{p})\, v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$	$\overline{\psi}(\mathbf{p}) = (v_{\mathbf{p}}, \psi)$
$\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3r_0\,\psi(\mathbf{r}_0)\,\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}_0) = (\xi_{\mathbf{r}_0}, \psi)$
$w_\alpha(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \int d\alpha\, c(\alpha)\, w_\alpha(\mathbf{r})$	$c(\alpha) = (w_\alpha, \psi)$
$\hat{\mathbf{e}}_i$	$\mathbf{A} = \sum_i a_i \hat{\mathbf{e}}_i$	$a_i = \hat{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{A}$

Espaço de estados (kets) $\mathcal{E}$

$$\boxed{\psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{F} \rightarrow |\psi\rangle \in \mathcal{E}}$$

Espaço dual $\mathcal{E}^*$ de funcionais lineares (bras) em $\mathcal{E}$:

$$\boxed{\chi[\psi(\mathbf{r})] \in \mathbb{C} \rightarrow \langle \cancel{\psi}\,\chi| \in \mathcal{E}^*}$$

Aula passada

Associação ket → bra: $|\psi\rangle \in \mathcal{E} \to \langle\psi| \in \mathcal{E}^*$ tal que $\langle\psi|\varphi\rangle = (|\psi\rangle, |\varphi\rangle)$

Associação bra → ket: $\langle\psi| \in \mathcal{E}^* \to |\psi\rangle \in \mathcal{E}$ tal que $c_i = \langle u_i|\psi\rangle = (\langle\psi|u_i\rangle)^*$

Em outras palavras, dada uma base discreta em $\mathcal{F}$, $\{u_i(\mathbf{r}) \in \mathcal{F}\}$ $i = 1, 2, 3 \ldots$

$$\psi[u_i(\mathbf{r})] = c_i^* \Rightarrow \psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i u_i(\mathbf{r})$$

Mas há bras cujos kets associados são não normalizáveis (exemplos: ondas planas e deltas de Dirac). Vamos generalizar $\mathcal{E}$ para conter também esses estados: kets generalizados.

Associação bra ↔ ket: $|\psi\rangle \in \mathcal{E} \leftrightarrow \langle\psi| \in \mathcal{E}^*$

Aula passada

Operadores lineares: $|\psi'\rangle = A\,|\psi\rangle$

Elemento de matriz de um opeador entre dois estados: $\langle\varphi|\,A\,|\psi\rangle$

Um ket seguido de um bra age como um opeador linear: $|\psi\rangle\,\langle\varphi|$

Projetor num estado: $P_\psi = |\psi\rangle\,\langle\psi|\,; \quad P_\psi^2 = P_\psi$

Projetor num sub-espaço $\mathcal{E}_s$: $P_{\mathcal{E}_s} = \sum_{i,u_i\in\mathcal{E}_s} |u_i\rangle\,\langle u_i|\,; \quad P_{\mathcal{E}_s}^2 = P_{\mathcal{E}_s}$

Atuação de um operador A em um bra: $\underbrace{[\langle\psi|\,A]}_{\langle\psi'|}\,|\varphi\rangle = \langle\psi|\,[A\,|\varphi\rangle] \Rightarrow \langle\psi|\,A\,|\varphi\rangle$

$\langle\psi|A = \langle\psi'|$

O conjugado Hermitiano (ou adjunto) de um operador

O ADJUNTO (OU CONJUGADO HERMITIANO) DE OPERADOR A

É UM OPERADOR A^{+} TAL QUE:

$$\langle \varphi | A^{+} | \psi \rangle = \left[\langle \psi | A | \varphi \rangle \right]^{*}$$

PARA QUAISQUER $|\psi\rangle$, $|\varphi\rangle$.

EM $\mathcal{F}$:

$$\int d^{3}r \, \varphi^{*}(\vec{r}) \left[A^{+} \psi(\vec{r}) \right] = \left[\int d^{3}r \, \psi^{*}(\vec{r}) \left[A \varphi(\vec{r}) \right] \right]^{*}$$

$$= \int d^{3}r \left[A \varphi(\vec{r}) \right]^{*} \psi(\vec{r})$$

DA DEFINIÇÃO: $\langle \varphi | A^\dagger | \psi \rangle = [\langle \psi | A | \varphi \rangle]^*$

SE DEFINIRMOS: $|\chi\rangle = A|\varphi\rangle$ TEMOS:

$\langle \varphi | A^\dagger | \psi \rangle = (\langle \psi | \chi \rangle)^* = \langle \chi | \psi \rangle$ PARA QUALQUER $|\psi\rangle$

LOGO: $\langle \varphi | A^\dagger = \langle \chi |$

AO KET $A|\varphi\rangle$ ESTÁ ASSOCIADO O BRA: $\langle \varphi | A^\dagger$

É CONVENIENTE DIZER QUE $\langle \varphi | A^\dagger$ É O "HERMITIANO CONJUGADO" DE $A|\varphi\rangle$

NOTE A MUDANÇA DE ORDEM!

$$(A|\varphi\rangle)^\dagger = \langle \varphi | A^\dagger$$

$$
\begin{tikzcd}
{} \arrow[rr, Rightarrow, "A"] & {} \arrow[d, phantom, "\updownarrow"] & {|\,\psi'\,\rangle = A\,|\,\psi\,\rangle} \arrow[d, leftrightarrow, squiggly] \\
{} \arrow[rr, Rightarrow, "A^{\dagger}"'] & {} & {\langle\,\psi'\,| = \langle\,\psi\,|\,A^{\dagger}}
\end{tikzcd}
$$

Propriedades importantes

i) $(A^\dagger)^\dagger = A$

ii) $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ (NOTE A MUDANÇA DE ORDEM)

$(ABC\ldots Z)^\dagger = Z^\dagger \ldots C^\dagger B^\dagger A^\dagger$

iii) $(\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger$

iv) $(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$

Exemplo

OPERADOR $D_x = \frac{\partial}{\partial x}$

TOME UM ELEMENTO DE MATRIZ QUALQUER:

$$\langle \varphi | D_x | \psi \rangle = \int d^3x \, \varphi^*(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}) =$$

$$= \int dy\, dz \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx \, \varphi^*(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}) \right] = \int dy\, dz \left[\cancel{\varphi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \Big|_{x \to -\infty}^{x \to +\infty}}^{\,0} - \right.$$

$$\left. - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, \frac{\partial \varphi^*(\vec{r})}{\partial x} \psi(\vec{r}) \right] = \int dx\, dy\, dz \left[-\frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \right] \psi(\vec{r})$$

$$= \left[\int d^3r \, \psi^*(\vec{r}) \left[-\frac{\partial \varphi(\vec{r})}{\partial x} \right] \right]^*$$

$$\Rightarrow \left[\langle \varphi | D_x | \psi \rangle \right]^* = \left[\langle \psi | (-D_x) | \varphi \rangle \right]^*$$

COMPARE COM:

$$\langle \psi | D_x^\dagger | \varphi \rangle = \left[\langle \varphi | D_x | \psi \rangle \right]^*$$

$$D_x^\dagger = -D_x$$

MAS: $P_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} D_x \Rightarrow P_x^\dagger = \left[\frac{\hbar}{i} D_x\right]^* = -\frac{\hbar}{i}(-D_x)$

$$= \frac{\hbar}{i} D_x = P_x$$

$$\Rightarrow \boxed{P_x^\dagger = P_x}$$

DE MANEIRA ANÁLOGA: X $\quad [X\,\varphi(\vec{r}) = x\,\varphi(\vec{r})]$

$$\langle\varphi|X|\psi\rangle = \int d^3r\, \varphi^*(\vec{r})\, x\, \psi(\vec{r}) = \left[\int d^3r\, \psi^*(\vec{r})\, x\, \varphi(\vec{r})\right]^*$$

$$\Rightarrow \langle\varphi|X|\psi\rangle = \left[\langle\psi|X|\varphi\rangle\right]^* \Rightarrow \langle\varphi|X^\dagger|\psi\rangle = \left[\langle\psi|X|\varphi\rangle\right]^*$$

$$\Rightarrow \boxed{X^\dagger = X}$$

ANALOGAMENTE: $P_y^\dagger = P_y$; $P_z^\dagger = P_z$; $Y^\dagger = Y$; $Z^\dagger = Z$

SE UM OPERADOR É IGUAL AO SEU ADJUNTO, ELE É AUTO-ADJUNTO / HERMITIANO

Conjugado Hermitiano de expressões

DADO O OPERADOR $B = |\psi\rangle\langle\varphi|$ SEU HERMITIANO CONJUGADO É:

$B^\dagger = |\varphi\rangle\langle\psi|$ (NOTE A MUDANÇA DE ORDEM)

UM PROJETOR $P = |\psi\rangle\langle\psi| \Rightarrow P^\dagger = |\psi\rangle\langle\psi| = P$

E ISSO TAMBÉM VALE PARA PROJETORES EM SUB-ESPAÇOS $P_\xi = \sum_{i=1}^{N} |u_i\rangle\langle u_i| \Rightarrow P_\xi^\dagger = P_\xi$

TODO PROJETOR É HERMITIANO!

DE MANEIRA GERAL, TOMAR O HERMITIANO CONJUGADO DE UMA EXPRESSÃO ENVOLVE:

- $\lambda \to \lambda^*$
- $|\psi\rangle \to \langle\psi|$ E $\langle\psi| \to |\psi\rangle$
- $A \to A^\dagger$
- INVERTER A ORDEM.

EXEMPLO: SEJA $\lambda \langle u|A|v\rangle \, |w\rangle\langle\psi|$. QUAL É O SEU HERMITIANO CONJUGADO:

- $\lambda^* [\langle u|A|v\rangle]^* [|w\rangle\langle\psi|]^\dagger = \lambda^* \langle v|A^\dagger|u\rangle \, |\psi\rangle\langle w|$
- $|\psi\rangle\langle w| \, \langle v|A^\dagger|u\rangle \lambda^* = \lambda^* \langle v|A^\dagger|u\rangle \, |\psi\rangle\langle w|$

Bases na notação de Dirac

DADA UMA BASE DISCRETA: $u_i(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ $\quad i = 1, 2, \ldots$

PODEMOS ASSOCIAR UM KET A CADA ELEMENTO:

$$u_i(\vec{r}) \in \mathcal{F} \longrightarrow |u_i\rangle \in \mathcal{E} \qquad i = 1, 2, 3, \ldots$$

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

FECHAMENTO: $|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$ $\qquad c_i = \langle u_i | \psi \rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_i \langle u_i | \psi \rangle |u_i\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i | \psi \rangle = \left[\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\right] |\psi\rangle$$

VÁLIDO PARA QUALQUER $|\psi\rangle$:

$$\Rightarrow \boxed{\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \mathbb{1}} \qquad \text{FECHAMENTO}$$

PARA BASES CONTÍNUAS:

$$w_\alpha(\vec{r}) \longrightarrow |w_\alpha\rangle$$ (KETS GENERALIZADOS)

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

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

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

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

SEMELHANTEMENTE PARA BASES MISTAS

Escolher uma base é chamado de "escolher uma representação"

$\{\,\vert\, u_i \,\rangle\}$ representation	$\{\,\vert\, w_\alpha \,\rangle\}$ representation
$\langle\, u_i \,\vert\, u_j \,\rangle = \delta_{ij}$ $P_{\{u_i\}} = \sum_i \vert\, u_i \,\rangle\langle\, u_i \,\vert = \mathbb{1}$	$\langle\, w_\alpha \,\vert\, w_{\alpha'} \,\rangle = \delta(\alpha - \alpha')$ $P_{\{w_\alpha\}} = \int \mathrm{d}\alpha \;\vert\, w_\alpha \,\rangle\langle\, w_\alpha \,\vert = \mathbb{1}$

Escolhida uma representação, ~~podemos~~ kets, bras e operadores podem ser tratados como conjuntos de números complexos, como veremos.

Notação matricial: kets e bras

DADA UMA REPRESENTAÇÃO $|u_i\rangle$: $|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$

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

É INTERESSANTE ESCREVER OS COEFICIENTES COMO UM VETOR-COLUNA!

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \langle u_3|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

OS BRAS: $\langle\varphi| = \sum_i \langle\varphi|u_i\rangle\langle u_i| = \sum_i b_i^* \langle u_i|$

$b_i = \langle u_i|\varphi\rangle \Rightarrow b_i^* = \langle\varphi|u_i\rangle$ E ESCREVEMO-LO COMO UM VETOR-LINHA: $(b_1^* \; b_2^* \; b_3^* \cdots) = (\langle\varphi|u_1\rangle \; \langle\varphi|u_2\rangle \cdots)$

Notação matricial: produto escalar

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \sum_i b_i^* c_i = (b_1^* c_1 + b_2^* c_2 + \cdots)$$

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \begin{pmatrix} b_1^* & b_2^* & b_3^* & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

ASSIM, O PRODUTO ESCALAR É O PRODUTO MATRICIAL.

Notação matricial: operadores

DADO A:
$$A = \left(\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\right) A \left(\sum_j |u_j\rangle\langle u_j|\right)$$

$$= \sum_{i,j} \underbrace{\langle u_i|A|u_j\rangle}_{A_{ij}} |u_i\rangle\langle u_j|$$

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

QUE A GENTE REPRESENTA COMO UMA MATRIZ

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix}$$

Notação matricial: atuação de operadores em kets

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| A \left(\sum_j |u_j\rangle\langle u_j|\right)|\psi\rangle$$

$$\| \quad = \sum_{ij} A_{ij} \underbrace{\langle u_j|\psi\rangle}_{c_j} |u_i\rangle$$

$$\sum_i c'_i |u_i\rangle$$

$$\Rightarrow \sum_i c'_i |u_i\rangle = \sum_i \left(\sum_j A_{ij} c_j\right)|u_i\rangle \Rightarrow c'_i = \sum_j A_{ij} c_j$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Notação matricial: elementos de matriz

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

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

$$= \begin{pmatrix} b_1^* & b_2^* & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Notação matricial: produtos de operadores

$$\langle u_i | AB | u_j \rangle = \sum_k \langle u_i | A | u_k \rangle \langle u_k | B | u_j \rangle$$

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

$$(AB) = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & \cdots \\ B_{21} & B_{22} & \cdots \\ \cdots & & \end{pmatrix}$$

Notação matricial: atuação de operadores em bras

$$\langle\varphi|A = \sum_{ij} \underbrace{\langle\varphi|u_i\rangle}_{b_i^*}\underbrace{\langle u_i|A|u_j\rangle}_{A_{ij}}\langle u_j| = \sum_j (b'_j)^*\langle u_j| = \langle\varphi'|$$

$$b'^*_j = \sum_i b_i^* A_{ij} \Rightarrow \begin{pmatrix} b_1^* & b_2^* & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \end{pmatrix}$$

Notação matricial: o operador adjunto

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

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

SE $A \to \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \longrightarrow A^{+} \to \begin{pmatrix} A_{11}^{*} & A_{21}^{*} & \cdots \\ A_{12}^{*} & A_{22}^{*} & \cdots \\ \cdots & & \end{pmatrix}$

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

Exemplos: espaço $\mathcal{E}$ bi-dimensional

$$\begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 3i & 2+i \end{pmatrix} \longrightarrow \text{OPERADOR LINEAR}$$

SEU ADJUNTO É $\begin{pmatrix} 1 & -3i \\ 4 & 2-i \end{pmatrix}$

Notação matricial: operadores hermitianos

$$A = A^{\dagger} \Rightarrow A = A^{T*} = A^{\dagger} \Rightarrow A_{ii} = A_{ii}^{*}$$

EM ESPAÇOS BI-DIMENSIONAIS:

$$\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

QUALQUER MATRIZ HERMITIANA 2×2 PODE SER ESCRITA COMO:

$$a\mathbb{1} + b\sigma_x + c\sigma_y + d\sigma_z = \begin{pmatrix} a+d & b-ic \\ b+ic & a-d \end{pmatrix}$$

$$(a,b,c,d) \in \mathbb{R}$$