Solução da equação de autovalor

- Na aula passada mostramos que a equação de autovalor, $A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$, poderia ser re-escrita com auxílio de uma base completa, $\{|u_i\rangle\}$, com dimensão finita N (para facilitar), desde que respeitasse $\begin{cases} \langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij} \rightarrow \text{ortonormalidade} \\ \sum_i^N |u_i\rangle\langle u_i| = \mathbb{1} \rightarrow \text{completeza.} \end{cases}$

  Primeiro, projetamos a equação em $|u_i\rangle$, isto é: $\langle u_i|A|\psi\rangle = \lambda\langle u_i|\psi\rangle$. Depois, usamos o operador unidade para obter:

$$\langle u_i|A\mathbb{1}|\psi\rangle = \sum_j^N \underbrace{\langle u_i|A|u_j\rangle}_{A_{ij}} \underbrace{\langle u_j|\psi\rangle}_{c_j} = \lambda \underbrace{\langle u_i|\psi\rangle}_{c_i} \Rightarrow \underbrace{\sum_j^N (A_{ij} - \lambda\delta_{ij})c_j = 0.}_{\text{equação linear e homogênea}}$$

- O sistema de equações acima tem uma solução trivial. Qual? Que tal, $c_j = 0 \ \forall\ j$. Qual é a condição para uma solução não trivial? $\Rightarrow \boxed{\det\left[A - \lambda I\right] = 0}$, onde A é uma matriz cujo elemento é A_{ij}. Essa é a *equação característica* do sistema. Esse determinante é uma equação de ordem N em λ. Consequentemente, possui N raízes $\begin{cases} \text{reais ou complexas} \\ \text{iguais ou distintas} \end{cases}$ $\Rightarrow$ Seria a equação característica independente da representação escolhida? No próximo slide mostraremos que sim.

Solução da equação de autovalor

- Digamos que para resolver a equação de autovalor, $A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$, tivéssemos escolhido outra base completa, $\{|t_k\rangle\}$, com mesma dimensão finita N, mas

respeitando $\begin{cases} \langle t_k|t_\ell\rangle = \delta_{k\ell} \rightarrow \text{ortonormalidade} \\ \\ \sum_\ell^N |t_\ell\rangle\langle t_\ell| = 1\!\!1 \rightarrow \text{completeza.} \end{cases}$ $\Rightarrow$ Seguindo os passos que

executamos para a base $\{|u_i\rangle\}$, teríamos:

$$\sum_\ell^N \underbrace{\langle t_k|A|t_\ell\rangle}_{A_{k\ell}^{(t)}} \underbrace{\langle t_\ell|\psi\rangle}_{c_\ell^{(t)}} = \lambda \underbrace{\langle t_k|\psi\rangle}_{c_k^{(t)}} \Rightarrow \underbrace{\sum_j^N \left(A_{k\ell}^{(t)} - \lambda\delta_{k\ell}\right) c_\ell^{(t)} = 0}_{\text{equação linear e homogênea na nova base}} \Rightarrow \overbrace{\det\left[A^{(t)} - \lambda I\right] = 0}^{\textit{nova equação característica}}$$

Colocamos o super-escrito (t) para lembrar que todos os elementos estão escritos em uma nova base. Nesse ponto ainda não sabemos se o conjunto de $\lambda' s$ continuará o mesmo. Para continuar, lembre que sabemos mudar de base.

$$\langle t_k|A|t_\ell\rangle = \sum_{ij} \langle t_k|u_i\rangle\langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|t_\ell\rangle \rightarrow A^{(t)} = S^\dagger A S \text{ com } S^\dagger S = I$$

Assim a nova equação característica, $\det\left[A^{(t)} - \lambda I\right] = 0$ poderia ser escrita por $\det\left[S^\dagger A S - \lambda S^\dagger S\right] = 0 \Rightarrow \det\left[S^\dagger (A - \lambda I) S\right] = 0 \Rightarrow \det S^\dagger \det\left[A - \lambda I\right] \det S = 0$, ou ainda, $\det\left(S^\dagger S\right) \det[A - \lambda I] = 0 \rightarrow \det[A - \lambda I] = 0$ *a equação de* $\{|u_i\rangle\}$.

Solução da equação de autovalor

- Consequência importante: *As raízes $\lambda's$ independem da escolha da representação.*

Estas raízes, os $\lambda's$, são os autovalores do operador A.

- Determinação dos autovetores.

  Seja λ_0 um autovalor de A. Vamos achar o(s) autovetor(es) correspondente(s). Trataremos separadamente o caso de um autovalor não-degenerado (raiz simples) e o caso degenerado (múltiplas raízes iguais).

◦ Caso (1). *λ é uma raiz simples da equação característica.* Chame-a de λ_0.

Graças a imposição da equação característica, o sistema $\displaystyle\sum_j^N [A_{ij} - \lambda_0 \delta_{ij}] c_j^{(\lambda_0)} = 0$

é linearmente dependente $\begin{cases} \text{Quantas variáveis desconhecidas? } N \to c_j^{(\lambda_0)} \quad j = 1, N; \\ \text{Quantas equações linearmente independentes? } N-1. \end{cases}$

Colocamos um sobrescrito (λ_0) nos $c_j^{(\lambda_0)}$ para lembrar o vetor que eles dizem respeito é o autovetor cujo autovalor é λ_0. Como temos apenas $N-1$ equações linearmente independentes, podemos solucionar esse sistema e obter $N-1$ dos c_j^0 em função do $N_{ézimo}$ coeficiente (escolha arbitrária). O $N_{ézimo}$ coeficiente será escolhido pela condição de normalização. Vamos escolher $N_{ézimo} = 1$ e realizar uma troca de variáveis $c_j^0 = \alpha_j^0 c_1^0$ com $\alpha_1^0 = 1$ ($N-1$ incógnitas).

Solução da equação de autovalor

Com essa escolha, teremos o autoket $|\psi_0(c_1^0)\rangle = \sum_j c_j^0 |u_j\rangle$ que pode se reescrito por: $|\psi_0(c_1^0)\rangle = \sum_j c_1^0 \alpha_j^0 |u_j\rangle = c_1^0 \sum_j \alpha_j^0 |u_j\rangle = c_1^0 |\psi_0\rangle$ com $|\psi_0\rangle = \sum_j \alpha_j^0 |u_j\rangle$.

- Note que a arbitrariedade, até então, de escolha do c_1^0 faz todos os $|\psi_0(c_1^0)\rangle$ colineares (eles diferem entre si por uma constante multiplicativa). Ao forçar $\langle\psi(c_1^0)|\psi_0(c_1^0)\rangle = 1$, acha-se $|c_1^0|$ e esta arbitrariedade se reduz à uma fase.
- Para achar os α_j^0 faça uso da equação de autovalores do slide anterior usando os α_j^0, isto é: $\sum_j^N [A_{ij} - \lambda_0 \delta_{ij}] c_j^{(\lambda_0)} = 0 \Rightarrow \sum_j^N [A_{ij} - \lambda_0 \delta_{ij}] \alpha_j^0 c_0^{(\lambda_0)} = 0$,

que pode ser reescrita por $\sum_{j=2}^N [A_{ij} - \lambda_0 \delta_{ij}] \alpha_j^0 = -[A_{i1} - \lambda_0 \delta_{i1}] \alpha_1^0$, um sistema de

produz N equações, pois $i = 1, ..., N$.

N–1 equações L.I., não-homogêneas (uma delas é ignorada, pois é combinação linear das outras) com $N-1$ incógnitas (lembre que $\alpha_1^0 = 1$). Realize os passos usuais (álgebra linear) para resolver esse sistema e encontre α_j^0 $(j = 2, ...N)$.

Esse procedimento pode ser aplicado para todos os autovalores não-degenerados.

Solução da equação de autovalor

- Caso (2). λ *é uma raiz múltipla de ordem* 2 da equação característica. Chame-a, novamente, de λ_0. Estudaremos só o caso onde A é Hermiteano. No caso anterior, o caso não-degenerado, foi possível obter uma solução não trivial, impondo dependência linear entre as N equações. Isso resultou em um sistema de $N-1$ equações linearmente independentes. Na situação com um autovalor λ_0 bi-degenerado, é possível mostrar que neste caso teríamos $N-2$ equações linearmente independentes.

  Isso permite que os c_j^0 sejam escritos em termos de dois deles, por exemplo, c_1^0 e c_2^0. Uma troca de variáveis agora seria $c_j^0 = \beta_j^0 c_1^0 + \gamma_j^0 c_2^0$, com $\beta_1^0 = \gamma_2^0 = 1$ e $\beta_2^0 = \gamma_1^0 = 0$. As variáveis β_j^0 e γ_j^0 podem ser encontradas da seguinte forma:

  componente $|u_1\rangle$ presente e $|u_2\rangle$ ausente

  $$\text{Suponha}\begin{cases} c_2^0 = 0 \text{ e ache } \beta_j^0 \to (N-2)\beta' s, \ \text{pois } \beta_1^0 = 1 \text{ e } \beta_2^0 = 0 \\ c_1^0 = 0 \text{ e ache } \gamma_j^0 \to (N-2)\gamma' s, \ \text{pois } \gamma_1^0 = 0 \text{ e } \gamma_2^0 = 1 \end{cases}$$

  componente $|u_1\rangle$ ausente e $|u_2\rangle$ presente

  Todos os autovetores associados com λ_0 tomam a forma:

  $$|\psi(c_1^0, c_2^0)\rangle = \sum_j c_j^0 |u_j\rangle = \sum_j \beta_j^0 c_1^0 |u_j\rangle + \sum_j \gamma_j^0 c_2^0 |u_j\rangle \text{ que pode ser reescrito}$$

  tem componente $|u_2\rangle$ mas não $|u_1\rangle$

  $$|\psi(c_1^0, c_2^0)\rangle = c_1^0 \sum_j \beta_j^0 |u_j\rangle + c_2^0 \sum_j \gamma_j^0 |u_j\rangle = c_1^0 |\psi_1^0\rangle + c_2^0 |\psi_2^0\rangle$$

  $|\psi_1^0\rangle$ e $|\psi_2^0\rangle$ não colineares

  tem componente $|u_1\rangle$ mas não $|u_2\rangle$

  $$\boxed{|\psi(c_1^0, c_2^0)\rangle \Rightarrow \text{constitui um espaço vetorial bi-dimensional.}}$$

Observáveis

- Quando A é Hermiteano, e se a multiplicidade da raiz λ_0 for q, existem $(N-q)$ equações linearmente independentes e q vetores L.I. com autovalor λ_0.
- Assim, para um operador A, Hermiteano, caso a dimensão do espaço seja N, é possível afirmar que existem N autovetores linearmente independentes.
- Para operadores não Hermiteanos, isso pode não ser verdade (A pode até não ser diagonalizável).

Observáveis.

Algumas propriedades dos autovetores e autovalores de operadores Hermiteanos:

- Os autovalores de um operador Hermiteano são reais.

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \lambda\langle\psi|\psi\rangle \Rightarrow \langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|A^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle^\star \Rightarrow \therefore\ \langle\psi|A|\psi\rangle \text{ é real.}$$

Como $\langle\psi|\psi\rangle$ também é real, concluímos que λ é real.

$$\text{implicações} \begin{cases} A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \Rightarrow \langle\psi|A^\dagger = \langle\psi|\lambda^\star \\ \text{mas, como } A^\dagger = A \text{ e } \lambda^\star = \lambda \end{cases} \Longrightarrow \text{ temos } \therefore\ \langle\psi|A = \langle\psi|\lambda$$

Conclusão: { *se $|\psi\rangle$ é autoket de A com autovalor λ, então $\langle\psi|$ é autobra de A com o mesmo autovalor.*

Note que $\forall\ |\varphi\rangle \in \mathcal{E}$, temos $\langle\psi|A|\varphi\rangle = \lambda\langle\psi|\varphi\rangle \Rightarrow$ será útil!

Observáveis

- Os autovetores de um operador Hermiteano, correspondendo a 2 autovalores diferentes, são ortogonais.

Suponha $\begin{cases} A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \\ \\ A|\varphi\rangle = \mu|\varphi\rangle \end{cases}$ $\rightarrow$ do que aprendemos até agora, podemos escrever:

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \lambda\langle\varphi|\psi\rangle = \mu\langle\varphi|\psi\rangle \Longrightarrow (\lambda-\mu)\langle\varphi|\psi\rangle = 0 \Longrightarrow \text{Se } \lambda \neq \mu,\ \overbrace{\langle\varphi|\psi\rangle = 0}^{\textit{ortogonais}}.$$

- *Preparativos para uma definição matemática de uma observável.*

Quando $\mathcal{E}$ tem dimensão finita, vimos que é sempre possível formar uma base com autovetores de um operador Hermiteano. Considere agora uma base de dimensão infinita, porém discreta.

Seja g_n, o grau de degenerescência de um autovalor $a_n \Rightarrow A|\psi_n^i\rangle = a_n|\psi_n^i\rangle$.

Isto implica que $i = 1, ...g_n$ e que para $i \neq i'$, $|\psi_n^i\rangle$ e $|\psi_n^{i'}\rangle$ são L.I.

Já mostramos que vetores de $\mathcal{E}_n$ (com autovalor a_n) são ortogonais aos de $\mathcal{E}_{n'}$ (com autovalor $a_{n'}$), pois $a_n \neq a_{n'} \Longrightarrow \langle\psi_n^i|\psi_{n'}^j\rangle = 0$ se $n \neq n'$. Como são L.I., dentro do subespaço $\mathcal{E}_n$, podemos sempre escolher $|\psi_n^i\rangle$, tais que $\langle\psi_n^i|\psi_n^j\rangle = \delta_{ij}$.

O operador Hermiteano A é uma observável se: $\displaystyle\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{i=1}^{g_n}|\psi_n^i\rangle\langle\psi_n^i| = \mathbb{1}$.

Observáveis

Comentários

- Uma vez que $\langle\psi_n^i|\psi_n^j\rangle=\delta_{ij}$, podemos definir $P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |\psi_n^i\rangle\langle\psi_n^i|$. Compare isso com $\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{i=1}^{g_n} |\psi_n^i\rangle\langle\psi_n^i| = \mathbb{1}$ e conclua que $\sum_{n=1}^{\infty} P_n = \mathbb{1}$.
- Note também que $AP_n = a_n P_n$, pois todos os kets que compõem P_n tem o mesmo autovalor.
- Finalmente, aplique as duas observações acima em

$$A|\varphi\rangle = A\mathbb{1}|\varphi\rangle = A\sum_{n=1}^{\infty} P_n|\varphi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} AP_n|\varphi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n P_n|\varphi\rangle = \Big(\sum_{n=1}^{\infty} a_n P_n\Big)|\varphi\rangle$$

Como isso vale $\forall|\varphi\rangle \Rightarrow \boxed{A = \sum_{n=1}^{\infty} a_n P_n.}$

- Vamos aplicar essa definição em $|\psi_n^i\rangle$ para ver se está coerente.

$$A|\psi_n^i\rangle = \sum_{n'=1}^{\infty} a_{n'} P_{n'}|\psi_n^i\rangle = \sum_{n'=1}^{\infty} a_{n'}\delta_{nn'}|\psi_n^i\rangle = a_n|\psi_n^i\rangle,$$ onde usamos

$$P_{n'}|\psi_n^i\rangle = \sum_{i'=1}^{g_{n'}} |\psi_{n'}^{i'}\rangle\langle\psi_{n'}^{i'}|\psi_n^i\rangle = \sum_{i'=1}^{g_{n'}} |\psi_{n'}^{i'}\rangle\delta_{nn'}\delta_{ii'} = \delta_{nn'}|\psi_n^i\rangle$$

Mais sobre operador unidade

- Alguns operadores Hermiteanos tem espectro contínuo e discreto misturados.

Neste caso $\begin{cases} A|\psi_n^i\rangle = a_n|\psi_n^i\rangle, \text{ com } n = 1, 2, ... \text{ e } i = 1, ..., g_n \\ \\ A|\psi_\nu\rangle = a(\nu)|\psi_\nu\rangle, \text{ com } \nu_1 \leq \nu \leq \nu_2 \end{cases}$ Estes kets são

obtidos de tal forma que $\begin{cases} \langle\psi_n^i|\psi_{n'}^{i'}\rangle = \delta_{nn'}\delta_{ii'} \\ \langle\psi_\nu|\psi_{\nu'}\rangle = \delta(\nu-\nu') \\ \langle\psi_n^i|\psi_{\nu'}\rangle = 0 \end{cases}$ e a relação de completeza

$\displaystyle\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{i=1}^{g_n}|\psi_n^i\rangle\langle\psi_n^i| + \int_{\nu_1}^{\nu_2} d\nu\ |\psi_\nu\rangle\langle\psi_\nu| = \mathbb{1}$ garante que se trata de uma observável.

- Se levássemos em conta o spin da partícula, a parte contínua também poderia adquirir uma degenerescência discreta.
- Exemplo: considere o projetor $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$, será uma observável?

Já sabemos que é Hermiteano, $P_\psi^\dagger = P_\psi$ e que seus autovalores são 1 ou 0, isto é

o operador P_ψ $\begin{cases} \text{autovalor} = 1 \Rightarrow |\varphi\rangle = |\psi\rangle \\ \\ \text{autovalor} = 0 \Rightarrow \forall|\varphi\rangle, \text{ tal que } \langle\psi|\varphi\rangle \end{cases}$

- ○ Um ket qualquer $|\varphi\rangle$ sempre pode ser escrito na forma:

$$|\varphi\rangle = P_\psi|\varphi\rangle + (1 - P_\psi)|\varphi\rangle.$$

Exemplo (continuação) e Observáveis que comutam

- Note também que $P_\psi|\varphi\rangle$ é um autoket de P_ψ com autovalor 1, pois

$$P_\psi(P_\psi|\varphi\rangle) = P_\psi^2|\varphi\rangle = P_\psi|\varphi\rangle$$

- E que $(1 - P_\psi)|\varphi\rangle$ é um autoket de P_ψ com autovalor 0, pois

$$P_\psi(1 - P_\psi)|\varphi\rangle = (P_\psi - P_\psi^2)|\varphi\rangle = (P_\psi - P_\psi)|\varphi\rangle = 0|\varphi\rangle$$

- Como $\forall\ |\varphi\rangle \in \mathcal{E}$ pode ser escrito em termos de $P_\psi|\varphi\rangle$ e $(1 - P_\psi)|\varphi\rangle$, podemos concluir que eles formam uma base e $\therefore$ P_ψ é uma observável.

- **Conjunto de observáveis que comutam.**

Nosso livro texto trata esse assunto de maneira formal com auxílio de teoremas.

Teorema I: $\begin{cases} \text{Se dois operadores } A \text{ e } B \text{ comutam, e se } |\psi\rangle \text{ é um autovetor de } A, \\ B|\psi\rangle \text{ também é um autovetor de } A \text{ com o mesmo autovalor.} \end{cases}$

Demonstração:

Se $|\psi\rangle$ é autovetor de $A \Longrightarrow A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$. Aplique B dos dois lados desta equação e obtenha $BA|\psi\rangle = aB|\psi\rangle$. Como $[A, B] = 0 \Rightarrow AB|\psi\rangle = aB|\psi\rangle$ e conclua: $B|\psi\rangle$ também é autoket de A com o mesmo autovalor a.

Comentários

(1) Se a não é degenerado, todos os autokets associados à ele são colineares, $\therefore$ $B|\psi\rangle \propto |\psi\rangle$.

o subespaço de autokets com autovalor a

(2) Se a for degenerado, $B|\psi\rangle$ é uma combinação de autovetores de $\mathcal{E}_a$.

Observáveis que Comutam

Comentários (continuação):

(3) O subespaço $\mathcal{E}_a$ é dito globalmente invariante sob a ação de B.

(4) Note que qualquer combinação de kets do subespaço $\mathcal{E}_a$ é um autoestado de A com auto valor a. Isso indica que uma determinada combinação poderá ser autoestado de A e B simultaneamente.

(5) Poderíamos ter tratado esse último item como um Teorema I':
Se dois operadores A e B comutam, qualquer subespaço de A é globalmente invariante sob a ação de B.

Teorema II: $\begin{cases} \text{Se duas observáveis } A \text{ e } B \text{ comutam, e se } |\psi_1\rangle \text{ e } |\psi_2\rangle \text{ são dois} \\ \text{autovetores de } A \text{ com autovalores diferentes, o elemento de matriz} \\ \langle\psi_1|B|\psi_2\rangle \text{ é zero.} \end{cases}$

Demonstração:

Se $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ são dois autovetores de $A \Rightarrow \begin{cases} A|\psi_1\rangle = a_1|\psi_1\rangle \\ \\ A|\psi_2\rangle = a_2|\psi_2\rangle \end{cases}$ e $\overbrace{\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0}$

De acordo com o teorema I, $B|\psi_2\rangle$ é autovetor de A com autovalor a_2 e isso garante que $|\psi_1\rangle \perp |\psi_2\rangle$, pois $a_1 \neq a_2$. $\therefore\ \langle\psi_1|B|\psi_2\rangle = 0$.

Observáveis que Comutam

Demonstração (continuação):

Uma outra forma de provar o teorema seria:

Primeiro considere que $\langle\psi_1|[A,B]|\psi_2\rangle = 0$, uma vez que eles comutam, $[A,B]=0$.

$$\text{Note}\begin{cases}\langle\psi_1|AB|\psi_2\rangle = a_1\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle \\ \\ \langle\psi_1|BA|\psi_2\rangle = a_2\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle\end{cases} \Rightarrow \langle\psi_1|[A,B]|\psi_2\rangle = (a_1-a_2)\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle = 0$$

e como o produto precisa ser zero e um dos fatores não é $(a_1 \neq a_2)$, conclua que

$$\boxed{\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle = 0 \text{ se } \begin{cases} A|\psi_1\rangle = a_1|\psi_1\rangle \\ \\ A|\psi_2\rangle = a_2|\psi_2\rangle \end{cases} \quad \text{com } a_1 \neq a_2}$$

Conclusão importante:

Se a representação matricial da observável A for diagonal, a representação de B nesta mesma base será no mínimo bloco-diagonal, onde os blocos serão os subespaços de autovalores degenerados de A.