

II. C.3. Representação dos kets e bras

Seja : $| \Psi \rangle = \sum_i c_i | u_i \rangle$ com $c_i = \langle u_i | \Psi \rangle$

Então, a representação de $| \Psi \rangle$ na base $| u_i \rangle$ e o vetor coluna:

Seja $| \rho \rangle = \sum_i b_i | u_i \rangle$. Então:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \end{pmatrix} \\ \langle \rho | = \langle \rho | \mathbb{1} = \langle \rho | P_{ij} = \sum_i \langle \rho | u_i \rangle \langle u_i | \\ = \sum b_i^* \langle u_i |, \text{ onde os } b_i^* \text{ são} \end{aligned}$$

as componentes do bra $\langle \rho |$ na base $\langle u_i |$

Considere agora o produto escalar:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | \mathbb{1} | \psi \rangle = \langle \varphi | \rho_{(0,1)} | \psi \rangle =$$

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

Considerando a representação proposta para $|\psi\rangle$ na forma de um vetor coluna, obteremos esse resultado para $\langle \varphi | \psi \rangle$ se representarmos $\langle \varphi |$ na forma de um vetor linha:

$$(b_1^*, b_2^*, b_3^*, \dots, b_n^*, \dots)$$

Pois: $(\quad) = (\text{número}) = (\text{produto escalar})$

II. C.4 Representação dos Operadores

Dada uma base $\{|u_i\rangle\}$, um operador A tem elementos de matriz A_{ij} definidos por:

$$A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle. \text{ Logo, na base } \{|u_i\rangle\} \text{ o}$$

operador A representado pela matriz:

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ A_{31} & A_{32} & \dots \end{pmatrix}$$

Representação do Ket

$$| \psi' \rangle = A | \psi \rangle$$

$$G'_i = \langle u_i | \psi' \rangle = \langle u_i | A | \psi \rangle$$

$$= \langle u_i | A | \sum_j | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle =$$

$$= \langle u_i | A | \sum_j | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle = \sum_j \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle$$

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

Portanto: $c'_j = \sum_i A_{ij} c_i$

$$\begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ c'_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & \dots \\ A_{31} & A_{32} & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Analogamente, pode-se mostrar que:

$$\langle \mathcal{R}(A) \rangle = (b_1^* \ b_2^* \ b_3^* \ \dots) \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$| \psi \rangle \langle \psi | = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} (c_1^* c_2^* c_3^* \dots) = \begin{pmatrix} c_1 c_1^* & c_1 c_2^* & \dots \\ c_2 c_1^* & c_2 c_2^* & \dots \\ c_3 c_1^* & c_3 c_2^* & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Representação do adjunto A^\dagger de A

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

se A é hermitiano então $A^\dagger = A$, ou seja

$$(A^\dagger)_{ij} = A_{ij} = A_{ji}^* \quad \text{Ou seja, a matriz é composta}$$

por elementos na diagonal que são reais e por elementos simétricos em relação à diagonal que são complexos conjugados um do outro:

$$A_{ii} = A_{ii}^* \quad \text{e} \quad A_{ij} = A_{ji}^*$$

II.5.5 Mudança de Representação

Sejam duas bases discretas $\{|u_i\rangle\}$ e $\{|k_r\rangle\}$. Kets, bras e operadores são motivados diferentemente quando representados nessas duas bases.

A matriz de mudança de base S é definida através dos elementos de matriz: $S_{ik} = \langle u_i | k_r \rangle$ que representam a decomposição de cada ket $|k_r\rangle$ na velha base $\{|u_i\rangle\}$.

$$\text{Também: } S_{k_1}^T = (S_{k_1}^T) = \langle u_i | k_1 \rangle^* = \langle k_1 | u_i \rangle$$

Para obter as componentes do vetor $|u_i\rangle$ na nova base $\{|k_r\rangle\}$ à partir das componentes na base

antiga $\{14_i\}$ basta inserir a noção de completude: (7)

$\langle k|q\rangle =$ as componentes de $|q\rangle$ na nova base $\{|k\rangle\}$

$$\begin{aligned}\langle k|q\rangle &= \langle k|1\rangle\langle 1|q\rangle = \langle k|1\rangle \sum_i 14_i \langle u_i|q\rangle = \\ &= \sum_i \langle k|14_i\rangle \langle u_i|q\rangle = \sum_i s_{ki} c_i\end{aligned}$$

onde os c_i 's são as componentes na base antiga.

Para um bra temos:

$$\begin{aligned}\langle q|k\rangle &= \langle q|1\rangle \sum_i 14_i \langle u_i|k\rangle = \sum_i \langle q|14_i\rangle \langle u_i|k\rangle \\ &= \sum_i c_i^* s_{ik}\end{aligned}$$

Para os elementos de matriz de um operador:

$$\begin{aligned} \langle k | A | l \rangle &= \langle k | \sum_i | u_i \rangle \langle u_i | A | \sum_j | v_j \rangle \langle v_j | l \rangle \\ &\quad \xrightarrow{\quad \quad \quad} \quad \quad \quad \xrightarrow{\quad \quad \quad} \\ &= \sum_i \langle k | u_i \rangle \sum_j \langle v_j | A | v_j \rangle \langle v_j | l \rangle \end{aligned}$$

Do seja: $A_{kr} = \sum_{ij} S_i^T A_{ij} S_r$

Analogamente: $A_{ij} = \sum_{kr} S_{kr} A_{kr} S_j^T$

II.0 - Equações de Autovalores. Observáveis

II.0.1 - Autovalores e autovetores de um operador

Seja A um operador então a equação:

$A|u\rangle = \lambda|u\rangle$, onde λ é um número complexo e $|u\rangle$ é chamado autovetor do operador

A com autovalor λ , e a equação de autovalores do operador linear A .

A equação acima tem soluções para apenas alguns valores de λ , chamados de autovalores de A .
O conjunto de autovalores de A é chamado espectro de A .

10
A é não degenerado se temos apenas um autovetor correspondente a ele (a menos de um fator constante, que pode ser eliminado exigindo-se que $\langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle$ seja normalizado, ou seja, $\langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle = 1$)

Se tivermos q autovetores linearmente independentes correspondentes a um único autovetor λ , este é dito degenerado. O conjunto de q autovetores associados com λ corresponde a um autoespaço do autovetor λ de dimensão q .

Matematicamente : $A \langle \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_q \rangle = \lambda \langle \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_q \rangle$
 $\langle \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_q \rangle = \delta_{ij}$

Seja $\{v_i\}$ um ket genérico no autoespaço
de A , ou seja: $A\{v_i\} = \sum_{i=1}^g c_i \cdot \lambda_i \{v_i\}$

Aplicando A em $\{v_i\}$ temos:

$$\begin{aligned} A\{v_i\} &= A \sum_{i=1}^g c_i \cdot \lambda_i \{v_i\} = \sum_{i=1}^g c_i \cdot A \lambda_i \{v_i\} = \\ &= \sum_{i=1}^g c_i \cdot A \lambda_i \{v_i\} = A \sum_{i=1}^g c_i \cdot \lambda_i \{v_i\} = A\{v_i\} \end{aligned}$$

Logo: $A\{v_i\} = A\{v_i\}$ e $\{v_i\}$ também é
autovetor de A com autovalor λ

Encontrando autovalores e autovetores de um operador

Dado um operador linear A , como encontrar seus autovalores e autovetores.

Vamos escolher uma representação $\{v_i\}$:

$$A|v_i\rangle = A|v_j\rangle \Rightarrow \langle v_i | A | v_j \rangle = A \langle v_i | v_j \rangle$$

Usando a notação de completeta:

$$\langle v_i | A | \sum_j v_j \rangle = A \langle v_i | v_j \rangle$$

$$\sum_j \langle v_i | A | v_j \rangle c_j = A c_i \Rightarrow \sum_j A_{ij} c_j = A c_i$$

$$\text{ou: } \sum_j [A_{ij} - A \delta_{ij}] c_j = 0$$

A equação acima representa um sistema linear homogêneo de equações com n desconhecidos. Uma solução não trivial para o sistema existe se e somente se: $\det [A - \lambda I] = 0$ onde A é a matriz quadrada representando o operador A , e I a matriz identidade de mesma dimensão. A equação acima é conhecida como equação característica.

$$\begin{pmatrix} A_{11} - \lambda & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} - \lambda & \dots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & \dots & \dots & A_{nn} - \lambda \end{pmatrix} = 0$$

14

A equação característica é independente da escolha da base. A existência de N auto-
vetores linearmente independentes depende das
características de A . Em particular, se A
for hermitiano, então é sempre possível
diagonalizá-lo.