Aula 3. 19/3/2025

Exemplo. Rotação de $90°$ no subespaço $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle\}$.

$$\hat{R}|e_1\rangle = |e_1\rangle\,,\quad \hat{R}|e_2\rangle = |e_3\rangle\,,\quad \hat{R}|e_3\rangle = -|e_2\rangle$$

Escreva a representação matricial de $\hat{R}$ e determine os seus valores e vetores próprios.

Resolução:
$$\begin{array}{cc} \hat{R} = & \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \\ & \begin{array}{ccc} \hat{R}|e_1\rangle & \hat{R}|e_2\rangle & \hat{R}|e_3\rangle \end{array} \end{array}$$

problema de valores próprios:
$$\hat{R}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \iff \hat{R}|\lambda\rangle - \lambda\hat{1}|\lambda\rangle = \hat{0} \iff (\hat{R}-\lambda\hat{1})|\lambda\rangle = 0$$

para que existam soluções diferentes da solução trivial ($|\lambda\rangle = |0\rangle$), é necessário que o determinante da matriz $\hat{R}-\lambda\hat{1}$ seja nulo:

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & -1 \\ 0 & 1 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \implies \lambda^2(1-\lambda) + 1-\lambda = 0 \implies (1-\lambda)(\lambda^2+1) = 0$$
$$\lambda_1 = 1\,,\quad \lambda_2 = i\,,\quad \lambda_3 = -i$$

vetores próprios de $\lambda_1 = 1$:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \implies \begin{cases} 0=0 \\ y+z=0 \\ y-z=0 \end{cases}$$

x qualquer, $y=0$, $z=0$
$$\implies |\lambda_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = |e_1\rangle \text{ (normaliza}$$

vetores próprios de $\lambda_2 = i$

$$\begin{bmatrix} 1-i & 0 & 0 \\ 0 & -i & -1 \\ 0 & 1 & -i \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \implies \begin{cases} (1-i)x = 0 \\ iy+z=0 \\ y-iz=0 \end{cases}$$

$x=0$, y qualquer, $z=-iy$

normalização: $y^2+|-iy|^2 = 2y^2 \implies y=$

$$\implies |\lambda_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -i \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|e_2\rangle - i|e_3\rangle\right)$$

vetores próprios de $\lambda_3 = -i$

$$\begin{bmatrix} 1+i & 0 & 0 \\ 0 & i & -1 \\ 0 & 1 & i \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \implies \begin{cases} (1+i)x=0 \\ iy-z=0 \\ y+iz=0 \end{cases}$$

$x=0$, y qualquer, $z=iy$

normalização: $y = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$$\implies |\lambda_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|e_2\rangle + i|e_3\rangle\right)$$

Repare que neste caso $\hat{R}^\dagger \neq \hat{R}$ (não é hermitica) e $\langle\lambda_i|\lambda_j\rangle = \delta_{ij}$

VALORES E VETORES PRÓPRIOS DE OPERADORES HERMÍTICOS

Os valores próprios de $\hat{\Omega}$ são, em geral, λ = número complexo

Se $|\lambda\rangle$ for vetor próprio, $z|\lambda\rangle$ também é. Podemos escolher $|\lambda\rangle$ normalizado ($\langle\lambda|\lambda\rangle = 1$)

$$\hat{\Omega}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \iff \langle\lambda|\hat{\Omega}^\dagger = \lambda^*\langle\lambda|$$

Se $\hat{\Omega}$ for hermítico e $\hat{\Omega}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \Rightarrow \langle\lambda|\hat{\Omega}^\dagger = \lambda^*\langle\lambda| = \langle\lambda|\hat{\Omega}$

ⓐ $\langle\lambda|\hat{\Omega}|\lambda\rangle = \lambda\langle\lambda|\lambda\rangle = \lambda^*\langle\lambda|\lambda\rangle \Rightarrow \boxed{\lambda^* = \lambda}$

Os valores próprios de um operado hermítico são números reais

ⓑ $\hat{\Omega}|\lambda_1\rangle = \lambda_1|\lambda_1\rangle$, $\hat{\Omega}|\lambda_2\rangle = \lambda_2|\lambda_2\rangle$ $(\lambda_1 \neq \lambda_2)$

$\langle\lambda_2|\hat{\Omega} = \lambda_2\langle\lambda_2| \Rightarrow \langle\lambda_2|\hat{\Omega}|\lambda_1\rangle = \lambda_2\langle\lambda_2|\lambda_1\rangle = \lambda_1\langle\lambda_2|\lambda_1\rangle$

$$\Rightarrow \underbrace{(\lambda_2 - \lambda_1)}_{\neq 0}\langle\lambda_2|\lambda_1\rangle = 0$$

$\Rightarrow \langle\lambda_2|\lambda_1\rangle = 0$ os vetores próprios de diferentes valores próprios são ortogonais

ⓒ Se existirem m vetores próprios do mesmo valor próprio λ_i que são linearmente independentes (degeneração), formam um subespaço de vetores próprios $|\lambda_i^j\rangle$ $(j=1,\dots,m)$ com valor próprio λ_i, que pode ser gerado por um conjunto de m kets ortogonais.

Os vetores próprios de um operador hermítico definem uma base ortonormal.

Se $\{|e_i\rangle\}$ for a base dos vetores próprios dum operador hermítico $\hat{\Omega}$, $\hat{\Omega}|e_i\rangle = \lambda_i|e_i\rangle \Rightarrow \Omega_{ji} = \delta_{ji}\lambda_i$

$$\hat{\Omega} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\delta_{ji}\lambda_i|e_j\rangle\langle e_i| = \sum_{i=1}^{n}\lambda_i|e_i\rangle\langle e_i|$$

(matriz diagonal $\begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & & \ddots \end{bmatrix}$

no caso em que há m kets $|\lambda_i^j\rangle$ $(j=1,\dots,m)$ próprios do valor próprio λ_i
λ_i aparece m vezes na diagonal

POSTULADOS DA MECÂNICA QUÂNTICA

① Em cada instante o estado de um sistema físico é descrito por um ket $|\psi\rangle$. Admitiremos que está <u>normalizado</u>. $(\langle\psi|\psi\rangle = 1)$.

② Dois estados diferentes, sem ambiguidade, $|\psi\rangle \neq |\varphi\rangle$, são descritos por kets ortogonais: $\langle\psi|\varphi\rangle = 0$

③ Qualquer variável dinâmica que possa ser medida no sistema é representada por um operador hermítico $\hat{\Omega}$ (chamado "observável").

④ A medição dum observável $\hat{\Omega}$ dá necessariamente um dos seus valores próprios, λ_i. A probabilidade de se obter o valor λ_i, quando o estado do sistema for $|\psi\rangle$, é:

$$P_i = \langle\psi|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|\psi\rangle = |\langle\lambda_i|\psi\rangle|^2$$

(ou: $\sum_{j=1}^{m} |\langle\lambda_i^j|\psi\rangle|^2$, se houver m vetores próprios independentes $|\lambda_i^j\rangle$)

Como $\{|\lambda_i\rangle\}$ é base ortonormal,

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \psi_i |\lambda_i\rangle \,, \quad \psi_i = \langle\lambda_i|\psi\rangle \implies P_i = |\psi_i|^2 \text{ e } \sum_{i=1}^{n} P_i = 1$$

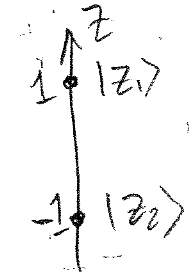
⑤ Se a medição de $\hat{\Omega}$ dá o valor λ_i, o estado do sistema muda abruptamente de $|\psi\rangle$ para $|\lambda_i\rangle$

A forma como o estado $|\psi\rangle$ varia em função do tempo, a partir dum instante inicial $t=0$, é:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)\,|\psi(0)\rangle$$

onde $\hat{U}(t)$ é o <u>operador de evolução</u>, que será estudado mais à frente. A expressão acima conduz à <u>equação de Schrödinger</u>.

SPIN

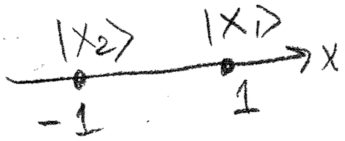


Observável $\hat{\sigma}_z$ com apenas dois estados próprios : $|z_1\rangle$ e $|z_2\rangle$ (diferentes sem ambig...) correspondentes aos dois sentidos numa direção z.

Na base dos estados $\{|z_1\rangle |z_2\rangle\}$, $\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$

Observe: $-|z_1\rangle$, $i|z_1\rangle$ e, em geral, $e^{i\theta}|z_1\rangle$ são todos equivalentes

Noutra direção x:

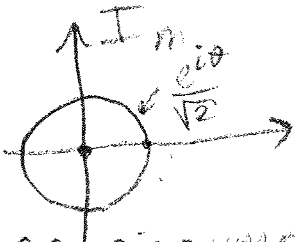


$$\begin{cases} |x_1\rangle = \alpha_1|z_1\rangle + \alpha_2|z_2\rangle \\ |x_2\rangle = \beta_1|z_1\rangle + \beta_2|z_2\rangle \end{cases}$$

$|x_1\rangle$ e $|x_2\rangle$ ortonormais $(\langle x_i|x_j\rangle = \delta_{ij})$

$\langle\sigma_z\rangle = 0 \Rightarrow |\alpha_1|^2 = |\alpha_2|^2 = |\beta_1|^2 = |\beta_2^2| = \frac{1}{2}$ = probabilidade de que $\hat{\sigma}_z$ tenha valores ± 1 nos estados $|x_1\rangle$ e $|x_2\rangle$

$\Rightarrow |\alpha_i| = |\beta_i| = \frac{1}{\sqrt{2}}$



α_i e β_i são números na circumferência de raio $\frac{1}{\sqrt{2}}$ e centro na origem, no plano complexo.

Podemos começar por escolher $\alpha_1 = \alpha_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$\Rightarrow \boxed{|x_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|z_1\rangle + |z_2\rangle\right)}$

para escolher β_1 e β_2 há que ter em conta que:

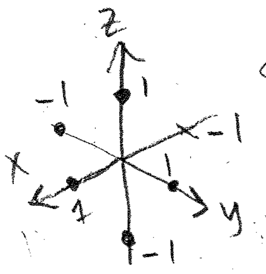
$\langle x_1|x_2\rangle = 0 \Rightarrow \alpha_1^*\beta_1 + \alpha_2^*\beta_2 = 0 \Rightarrow \beta_1 = -\beta_2$

escolhendo números reais, $\beta_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $\beta_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$

$$|x_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|z_1\rangle - |z_2\rangle\right)$$

Direção y:

$|y_1\rangle = \gamma_1|z_1\rangle + \gamma_2|z_2\rangle$, $|y_2\rangle = \delta_1|z_1\rangle + \delta_2|z_2\rangle$



$\langle\hat{\sigma}_z\rangle = 0 \Rightarrow |\gamma_i|^2 = |\delta_i|^2 = \frac{1}{2} \Rightarrow |\gamma_i| = |\delta_i| = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \gamma_i = \frac{e^{i\theta}}{\sqrt{2}}$

$\langle\hat{\sigma}_x\rangle = 0 \Rightarrow$

$\langle y_1|x_1\rangle\langle x_1|y_1\rangle = \langle y_1|x_2\rangle\langle x_2|y_1\rangle = \langle y_2|x_1\rangle\langle x_1|y_2\rangle = \langle y_2|x_2\rangle\langle x_2|y_2\rangle =$

(probabilidade de que $\hat{\sigma}_x$ tenha valores ± 1 nos estados $|y_1\rangle$ e $|y_2\rangle$)

$$\langle y_1|x_1\rangle\langle x_1|y_1\rangle = |\langle x_1|y_1\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle z_1| + \langle z_2|\right)\left(\gamma_1|z_1\rangle + \gamma_2|z_2\rangle\right)\right|^2$$

$$= \frac{1}{2}\left|\gamma_1+\gamma_2\right|^2 = \frac{1}{2}(\gamma_1^*+\gamma_2^*)(\gamma_1+\gamma_2) = \frac{1}{2}(1+\gamma_1^*\gamma_2+\gamma_2\gamma_1^*)$$

como deverá ser igual a $\frac{1}{2}$,

$$\Rightarrow \gamma_1^*\gamma_2 = -\gamma_2\gamma_1^* = -(\gamma_1^*\gamma_2)^* \Rightarrow \gamma_1^*\gamma_2 \text{ é imaginário puro}$$

$\Rightarrow$ se γ_1 for real, então γ_2 será imaginário puro

De forma semelhante:

$$\langle y_2|x_1\rangle\langle x_1|y_2\rangle = \frac{1}{2}|\delta_1+\delta_2|^2 = \frac{1}{2}(1+\delta_1^*\delta_2+\delta_2\delta_1^*)$$

$\Rightarrow$ se δ_1 for real, δ_2 será imaginário puro

Por ortogonalidade, $\gamma_1^*\delta_1 + \gamma_2^*\delta_2 = 0$

$$\Rightarrow \boxed{|y_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|z_1\rangle + i|z_2\rangle\right)} \quad \boxed{|y_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|z_1\rangle - i|z_2\rangle\right)}$$

MATRICES DE PAULI

$$\hat{\sigma}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad \hat{\sigma}_x \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & +1/\sqrt{2} \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \hat{\sigma}_x \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

(as matrises são também espaço vetorial $\Rightarrow$ inversa única)

$$\Rightarrow \hat{\sigma}_x = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\sigma}_y \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} \end{bmatrix} \Rightarrow \hat{\sigma}_y \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ i & i \end{bmatrix}$$

$$\hat{\sigma}_y = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ i & i \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$