Aula (4) Autovalores e Auto Vetores

Em geral, a ação de um operador Ω num vetor $|V\rangle$ muda ele completamente:

$$\Omega |V\rangle = |V'\rangle$$

onde $|V'\rangle \neq c|V\rangle$ com c um número.

Porém em alguns casos isso acontece: um operador aplicado a um vetor $|V\rangle$ resulta num vetor proporcional a $|V\rangle$ (na mesma "direção")

$\Rightarrow$ Nesse caso:
$$\boxed{\Omega |V\rangle = \omega |V\rangle}$$

com ω um número.

Quando isso acontece chamamos $|V\rangle$ de <u>autovetor</u> de Ω. Entanto ω é o <u>autovalor</u>

Autovetores e autovalores tem um papel muito importante na mecânica quântica.

Vamos detalhar como obter-los e alguns exemplos

Exemplo 1 Operador identidade.

$$\mathbb{I}|V\rangle = |V\rangle$$

Claramente, todos os vetores SÃO autovetores de $\mathbb{I}$ com autovalor 1.

Exemplo 2

$$\Omega = \mathbb{P}_V$$

onde $\mathbb{P}_V$ é o projetor na direção de um vetor $|V\rangle$ normalizado, i.e. $\langle V|V\rangle = 1$

$$\Rightarrow \mathbb{P}_V = |V\rangle\langle V|$$

. Então qualquer vetor $\alpha|V\rangle$ "paralelo" a $|V\rangle$ (α número) será um autovetor de $\mathbb{P}_V$

Prova: $\mathbb{P}_V(\alpha|V\rangle) = |V\rangle\langle V|(\alpha|V\rangle)$

$$= \alpha|V\rangle\langle V|V\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\mathbb{P}_V(\alpha|V\rangle) = \alpha|V\rangle}$$

$\Rightarrow \alpha|V\rangle$ é autovetor de $\mathbb{P}_V$ com autovalor 1

- Um vetor ortogonal a $|v\rangle$, $|v_\perp\rangle$ é também autovetor do $\mathbb{P}_v$, mais com autovalor $\emptyset$.

$$\mathbb{P}_v |v_\perp\rangle = |v\rangle \underbrace{\langle v|v_\perp\rangle}_{=0} = \emptyset\, |v_\perp\rangle$$

- Por outra parte, vetores que são combinações lineares de $|v\rangle$ e $|v_\perp\rangle$ <u>NÃO</u> são autovetores de $\mathbb{P}_v$.

$$\mathbb{P}_v \left(\alpha |v\rangle + \beta |v_\perp\rangle\right) = \alpha |v\rangle\langle v|v\rangle + \beta |v\rangle \underbrace{\langle v|v_\perp\rangle}_{=0}$$

$$= \alpha |v\rangle \neq \gamma \left(\alpha |v\rangle + \beta |v_\perp\rangle\right)$$

<u>Exemplo 3</u> O operador $R(\frac{\pi}{2}\hat{i})$ na base $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$

Sabemos que $R(\frac{\pi}{2}\hat{i})|1\rangle = |1\rangle$

$\Rightarrow |1\rangle$ é um autovetor de $R(\frac{\pi}{2}\hat{i})$ com <u>autovalor 1</u>

Em geral, qualquer vetor proporcional a $|1\rangle$ será um <u>autovetor</u> de $R(\frac{\pi}{2}\hat{i})$.

$$R(\tfrac{\pi}{2}\hat{i})\, \alpha|1\rangle = \alpha |1\rangle$$

O importante é achar os autovetores com alguma normalização arbitrária. Os outros, proporcionais a esses são <u>trivialmente autovetores</u>.

I.e. Se $\Omega|V\rangle = \omega|V\rangle$

então

$$\boxed{\begin{aligned}\Omega(\alpha|V\rangle) &= \alpha\,\Omega|V\rangle = \alpha\omega|V\rangle \\ &= \omega(\alpha|V\rangle)\end{aligned}}$$

No caso de $R(\frac{\pi}{2}\hat{i})$, além de $|1\rangle$ tem mais dois autovetores. Para achar eles precisamos de um método rigoroso.

Solução Geral do Problema de Autovalores

Partindo da equação fundamental

$$\Omega|V\rangle = \omega|V\rangle$$

podemos escrevê-lo como

$$(\Omega - \omega\mathbb{I})|V\rangle = |0\rangle$$

Isto claramente quer dizer que

$$\det(\Omega - \omega\mathbb{I}) = 0$$

Uma forma de ver que o determinante deve ser zero, é definir o inverso

$$(\Omega - \omega \mathbb{I})^{-1}$$

e obter $$|V\rangle = (\Omega - \omega \mathbb{I})^{-1} |0\rangle \quad !$$

Mas isto não faz sentido! O vetor $|0\rangle$ é simplesmente 0! Como é que a gente obtém $|V\rangle$ a partir dele? A única explicação para que a equação de cima não seja possível é que o operador inverso de $(\Omega - \omega \mathbb{I})$ não exista (ou esteja definido).

Mas o inverso é (pensando $\Omega - \omega\mathbb{I}$ como matriz)

$$(\Omega - \omega \mathbb{I})^{-1} = \frac{\text{Cofator de } (\Omega - \omega \mathbb{I})^{T}}{\det(\Omega - \omega \mathbb{I})}$$

então se o determinante é zero, o inverso não está definido.

$$\Rightarrow \quad \boxed{\det(\Omega - \omega \mathbb{I}) = 0} \qquad \text{Equação característica}$$

Essa é a equação que vai determinar os autovalores ω

Projetando num bra $\langle i|$ da base temos

$$(\Omega - \omega \mathbb{I})|V\rangle = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\langle i|\Omega - \omega \mathbb{I}|V\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \quad \langle i|\Omega - \omega \mathbb{I}| \sum_{j=1}^{n} v_j |j\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \quad \sum_{j=1}^{n} v_j \langle i|\Omega - \omega \mathbb{I}|j\rangle = 0 \quad \text{ou}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\sum_{j=1}^{n} v_j \left(\Omega_{ij} - \omega \delta_{ij}\right) = 0}$$

↳ essa equação determina os componentes v_j dos autovetores

⇒ uma vez conhecidos os autovalores ω obtemos um conjunto de autovetores. Lembrando que só estamos interessados nos autovetores distintos → em direções diferentes.

Por convenção, vamos normalizá-los.

Exemplo $R(\frac{\pi}{2}\hat{i})$

Lembrando que o operador $R(\frac{\pi}{2}\hat{i})$ tem a representação matricial

$$R(\tfrac{\pi}{2}\hat{i}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

A equação característica é

$$\det(R - \omega \mathbb{I}) = \det \begin{pmatrix} 1-\omega & 0 & 0 \\ 0 & -\omega & -1 \\ 0 & 1 & -\omega \end{pmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{(1-\omega)(\omega^2+1) = 0}$$

$\Rightarrow$ Soluções para os autovalores $\boxed{\omega = 1, \pm i}$

ou $\omega_1 = 1$; $\omega_2 = i$, $\omega_3 = -i$

Agora, já sabíamos que $\omega_1 = 1$ é um autovalor de $|1\rangle$. Vamos conferir usando o método geral:

Como temos a liberdade de escolher v_1, usamos como convenção um autovetor normalizado

$$\Rightarrow \quad |\omega_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |1\rangle$$

↳ autovetor associado ao autovalor ω_1

Para obter o autovetor associado a $\omega_2 = i$

$$\begin{pmatrix} 1-i & 0 & 0 \\ 0 & -i & -1 \\ 0 & 1 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$(1-i)v_1 = 0 \Rightarrow v_1 = 0$$

$$\left.\begin{array}{l} -iv_2 - v_3 = 0 \Rightarrow v_2 = iv_3 \\ v_2 - iv_3 = 0 \Rightarrow v_2 = iv_3 \end{array}\right] v_2 = iv_3 \checkmark$$

$$\Rightarrow |\omega_2\rangle \propto \begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix}$$

Impondo a normalização /

$$\langle\omega_2|\omega_2\rangle = 1$$

Teorema: Os autovalores de um operador hermitiano são reais

Já tínhamos provado isso! Isto garante a conservação da probabilidade derivada da equação de Schrödinger! Mas vamos provar na linguagem de matrizes, vetores, etc.

$$\Omega|\omega\rangle = \omega|\omega\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \langle\omega|\Omega|\omega\rangle = \omega\langle\omega|\omega\rangle$$

Tomando o adjunto, obtemos

$$\langle\omega|\Omega^\dagger|\omega\rangle = \omega^*\langle\omega|\omega\rangle$$

dado que $\langle\omega|\omega\rangle$ é real!

Mas um operador hermitiano satisfaz

$$\Omega = \Omega^\dagger$$

$$\Rightarrow \quad \langle\omega|\Omega|\omega\rangle = \omega^*\langle\omega|\omega\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\omega = \omega^*}$$

Teorema: Para um operador Ω hermitiano os seus autovetores formam uma base ortonormal

$$\{|\omega_i\rangle\}$$

, onde ω_i's são os autovalores

e, nessa base, Ω é expressado como uma matriz diagonal dada por os autovalores

$$\Omega = \begin{pmatrix} \omega_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \omega_2 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & & \omega_n \end{pmatrix}$$

Prova: (Sem degenerescência)

$$\Omega|\omega_i\rangle = \omega_i|\omega_i\rangle$$

e para um outro autovetor de autovalor ω_j temos

$$\Omega|\omega_j\rangle = \omega_j|\omega_j\rangle$$

Multiplicando a primeira equação pelo bra $\langle\omega_j|$

$$\langle\omega_j|\Omega|\omega_i\rangle = \omega_i\langle\omega_j|\omega_i\rangle$$

e a segunda equação por $\langle\omega_i|$,

$$\langle\omega_i|\Omega|\omega_j\rangle = \omega_j\langle\omega_i|\omega_j\rangle$$

Se a gente toma o adjunto dessa última equação obtemos

$$\langle \omega_j | \Omega^{\dagger} | \omega_i \rangle = \omega_j^* \langle \omega_i | \omega_j \rangle^*$$

Mas $\Omega = \Omega^{\dagger} \Rightarrow$

$$\langle \omega_j | \Omega | \omega_i \rangle = \omega_j^* \langle \omega_j | \omega_i \rangle$$

o lado esquerdo dessa identidade é igual a da primeira equação para o elemento de matriz de Ω. Subtraindo ela de aquela temos que

$$0 = (\omega_i - \omega_j^*) \langle \omega_j | \omega_i \rangle$$

deve ser satisfeita se Ω é hermitiano

Vemos que para o caso $\underline{\underline{i=j}}$, dado que

$$\langle \omega_i | \omega_i \rangle \neq 0$$

deve valer $\boxed{\omega_i = \omega_i^*}$

o que é uma outra prova que os autovalores de Ω hermitiano devem ser reais.

Para o caso $i \neq j$ temos que deve ser

$$\langle \omega_j | \omega_i \rangle = 0$$

$\Rightarrow$ os autovetores de um operador hermitiano são ortogonais

Então se os autovetores de autovalores distintos são ortogonais podemos associá-los a uma base ortonormal $\{|\omega_i\rangle\}$ uma vez que eles podem ser normalizados.

Isto prova o teorema:

$$\langle \omega_i | \Omega | \omega_j \rangle = \Omega_{ij} = \omega_j \delta_{ij}$$

Exceção: Voltando a equação

$$0 = (\omega_i - \omega_j^*) \langle \omega_j | \omega_i \rangle$$

vemos que se $\omega_i = \omega_j$ (real) para $|\omega_i\rangle \neq |\omega_j\rangle$ então não podemos concluir que $\langle \omega_j | \omega_i \rangle = 0$.

Esse é o caso de degenerescência.

Nesse caso veremos que tem um subespaço de autovetores associados a o autovalor degenerado.

Degenerescência

Consideremos a situação onde dois autovetores compartilham o mesmo autovalor ω

$$\left.\begin{aligned} \Omega|\omega_1\rangle &= \omega|\omega_1\rangle \\ \Omega|\omega_2\rangle &= \omega|\omega_2\rangle \end{aligned}\right\}$$

Isto implica que qualquer combinação linear de $|\omega_1\rangle$ e $|\omega_2\rangle$ também tem esse autovalor

i.e:

$$\Omega\left(\alpha|\omega_1\rangle + \beta|\omega_2\rangle\right) = \alpha\omega|\omega_1\rangle + \beta\omega|\omega_2\rangle$$

$$= \omega\left(\alpha|\omega_1\rangle + \beta|\omega_2\rangle\right)$$

$\Rightarrow$ A degenerescência implica a existência de um subespaço (de dimensão 2 nesse exemplo) contento um número infinito de autovetores (dado que α e β são arbitrários). I.e. existe um número infinito de pares $|\omega_1'\rangle$ e $|\omega_2'\rangle$ ortogonais que tem esse autovalor.

Exemplo :

$$\Omega = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Vemos que $\Omega^{+} = (\Omega^{T})^{*} = \Omega \Rightarrow$ hermitiana

Eq. característica

$$\det \begin{pmatrix} 1-\omega & 0 & 1 \\ 0 & 2-\omega & 0 \\ 1 & 0 & 1-\omega \end{pmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} (1-\omega)(2-\omega)(1-\omega) - (2-\omega) = 0 \\ \Rightarrow (2-\omega)\left[(1-\omega)^2 - 1\right] = 0 \\ (2-\omega)\left[\omega^2 - 2\omega\right] = 0 \\ \Rightarrow \omega(\omega-2)^2 = 0 \end{cases} \quad \begin{matrix} \omega_1 = 0 \\ \left.\begin{matrix} \omega_2 = 2 \\ \omega_3 = 2 \end{matrix}\right] \text{deg.} \end{matrix}$$

Para $\omega = 0$, obtemos o autovetor das equações

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \begin{cases} V_1 + V_3 = 0 \\ 2V_2 = 0 \rightarrow V_2 = 0 \\ V_1 + V_3 = 0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} V_1 = -V_3 \\ V_2 = 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow |\omega_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix}$$

Já normalizado (e.g. $\langle\omega_1|\omega_1\rangle = 1$)

Mas para $\omega_2 = 2 = \omega_3$, temos as equações:

$$\Omega - \omega_1 \mathbb{I} = \begin{pmatrix}1-2 & 0 & 1\\0 & 2-2 & 0\\1 & 0 & 1-2\end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix}-1 & 0 & 1\\0 & 0 & 0\\1 & 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}V_1\\V_2\\V_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\\0\end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \left.\begin{array}{r}-V_1 + V_3 = 0\\0 = 0\\V_1 - V_3 = 0\end{array}\right\} \Rightarrow V_1 = V_3 \;;\; V_2 \text{ indeterminado!}$$

$\Rightarrow$ Para fixar os dois autovetores ortogonais $|\omega_2\rangle$ e $|\omega_3\rangle$ precisamos escolher um valor totalmente arbitrário de V_2 (a verdade de V_2/V_1).

Por exemplo escolhemos

$$\boxed{V_2 = 1} \quad (V_2/V_1 = 1)$$

$$\Rightarrow |\omega_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}$$

Finalmente, para obter $|w_3\rangle$, devemos impor ainda $v_1 = v_3$ mas agora v_2 é tal que

$$\langle w_2 | w_3 \rangle = 0$$

$$\Rightarrow \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ v_2 \\ 1 \end{pmatrix} = 1 + v_2 + 1 = 0$$

$\Rightarrow \boxed{v_2 = -2}$ para $|w_3\rangle$

$$\Rightarrow \boxed{|w_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}}$$ Já normalizado ✓

$\{|w_2\rangle, |w_3\rangle\}$ formam um subespaço degenerado associado ao autovalor $\omega = 2$. Outras escolhas de v_2 resultariam em $\{|w_2'\rangle, |w_3'\rangle\}$.

Propriedades de Operadores Unitários

Se um operador U é unitário, ele satisfaz

$$UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{I} \quad (\text{ou } U^\dagger = U^{-1})$$

Theorema: os autovalores de U são números complexos de valor absoluto 1.

Seus autovetores são ortogonais (sem degener.)

Prova:

$$\begin{cases} U|u_i\rangle = u_i|u_i\rangle & \text{autovalor } u_i \\ U|u_j\rangle = u_j|u_j\rangle & \text{autovalor } u_j \end{cases}$$

$$\langle u_j|U^\dagger = \langle u_j|u_j^* \leftarrow \text{adjunto}$$

$$\Rightarrow \langle u_j|U^\dagger U|u_i\rangle = u_j^* u_i \langle u_j|u_i\rangle$$

$$\Rightarrow \langle u_j|u_i\rangle = u_j^* u_i \langle u_j|u_i\rangle$$

ou $\left\{ (1 - u_j^* u_i)\langle u_j|u_i\rangle = 0 \right\}$

Então, se $i = j \Rightarrow \langle \mu_j | \mu_i \rangle = \langle \mu_i | \mu_i \rangle \neq 0$ (20)

$$\Rightarrow \boxed{\mu_j^* \mu_i = \mu_i^* \mu_i = |\mu_i|^2 = 1}$$

Mas se $i \neq j$, então precisamos

$$\langle \mu_j | \mu_i \rangle = 0$$

Diagonalização de Matrices Hermitianas

Consideremos um operador hermitiano Ω.

- Pode ser representado por uma matriz Ω_{ij} numa dada base ortonormal $\{|i\rangle\}$.

Ou

- Pode ser representado por uma matriz na base ortonormal definida por seus autovetores $\{|\omega_i\rangle\}$

Nesse último caso, sabemos que a matriz é diagonal:

$$\Omega_{ij} = \begin{pmatrix} \omega_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \omega_2 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \omega_n \end{pmatrix}$$

Isto quer dizer que existe um operador que transforma $\{|i\rangle\} \xrightarrow{\text{em}} \{|w_i\rangle\}$.

Esse operador deve ser unitário!

Porquê? Dado que ambas bases são ortonormais o operador transformando $\{|i\rangle\} \longrightarrow \{|w_i\rangle\}$ deve preservar o produto interno.

I.é:

$$|w_i\rangle = U|i\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \langle w_j| = \langle j|U^\dagger$$

$$\Rightarrow \quad \langle w_j|w_i\rangle = \langle j|U^\dagger U|i\rangle = \langle j|i\rangle = \delta_{ij} \checkmark$$

$\Rightarrow$ Todo operador hermitiano em um espaço $V^n(\mathbb{C})$ pode ser diagonalizado por uma transformação unitária

Outra forma de dizer o mesmo:

Na base $\{|i\rangle\}$ Ω não é diagonal.

$$\langle i|\Omega|j\rangle = \Omega_{ij}$$: ~~matriz~~ não diagonal

Inserindo $U^{+}U = I = UU^{+}$ tal que

$$\langle i|U^{+}U\Omega U^{+}U|j\rangle = \langle \omega_i|U\Omega U^{+}|\omega_j\rangle$$

onde $\{|\omega_i\rangle\}$ são os autovetores do Ω.

$\Rightarrow$ A transformação de um operador hermitiano Ω de uma base ortonormal qualquer para a sua base de autovetores (onde Ω_{ij} é diagonal) pode ser reformulada dizendo que para todo operador hermitiano Ω existe uma transformação unitária U tal que

$$(U\Omega U^{+})_{ij} \text{ é diagonal}$$

Dizemos que U diagonaliza Ω.

Operadores Hermitianos que Comutam

Consideramos dois operadores hermitianos Ω e Λ satisfazendo

$$[\Omega, \Lambda] = 0 \quad ; \text{ i.e. } \Omega\Lambda - \Lambda\Omega = 0$$

A base ortonormal de autovetores de Ω é $\{|\omega_i\rangle\}$

Então (Assumindo que não tem deg.)

$$\Omega|\omega_i\rangle = \omega_i|\omega_i\rangle$$

Se agora aplicamos Λ em ambos lados, temos

$$\Lambda\Omega|\omega_i\rangle = \omega_i \Lambda|\omega_i\rangle$$

$$\Omega\Lambda|\omega_i\rangle = \omega_i \Lambda|\omega_i\rangle$$

Essa última igualdade diz que o vetor

$$\Lambda|\omega_i\rangle$$

é um autovetor de Ω com autovalor ω_i.
Mas, em ausência de degenerescência, o autovetor de autovalor ω_i é único a menos de um reescalonamento arbitrário, eg por um fator λ_i

$$\Rightarrow \quad \Lambda|\omega_i\rangle \propto |\omega_i\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\Lambda|\omega_i\rangle = \lambda_i|\omega_i\rangle}$$

Então concluimos que $|w_i\rangle$ é também um autovetor do operador Λ com autovalor λ_i.

Dado que todos os autovetores de Ω são também autovetores de Λ, a mesma transformação unitária U que diagonaliza o operador Ω, também diagonaliza Λ.

$\Rightarrow$ Ω e Λ são simultaneamente diagonalizáveis

Se Ω é não-degenerado, então só existe uma única base onde ambos são diagonais.

$\Rightarrow$ Basta saber que 1 deles é não degenerado.

Se ambos Ω e Λ são degenerados a prova é mais complicada, mas ainda o resultado é o mesmo.