Operador linear

Um operador é uma entidade matemática ($\hat{O}: E \longrightarrow E$) que atuando à esquerda de um vetor ket $|a\rangle \in E$ retorna um vetor ket $|b\rangle \in E$, ou seja, $\hat{O}|a\rangle = |b\rangle$. De modo similar, quando o operador atua à direita de um vetor bra produz outro vetor bra: $\langle a|\hat{O} = \langle b|$.

Como o vetor ket é, por definição, uma matriz coluna e o vetor bra é uma matriz linha e o operador linear é representado por uma matriz, não faz sentido escrevermos $|a\rangle\hat{O}$ ou $\hat{O}\langle a|$.

Estas notações ($|a\rangle\hat{O}$ e $\hat{O}\langle a|$) são notações *proibidas*. Uma outra notação que também não é permitida é $|a\rangle|b\rangle$ ou $\langle a|\langle b|$. Note que

$$|a\rangle|b\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

Este produto não faz sentido.

Em mecânica quântica, estamos particularmente interessados nos operadores lineares, ou seja, operadores que obedecem ao seguinte axioma:

$$\hat{O}(\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle) = \alpha\hat{O}|a\rangle + \beta\hat{O}|b\rangle \text{ para } \forall|a\rangle, |b\rangle \in E \text{ e } \forall\alpha, \beta \in K.$$

Exemplo 1. O operador diferencial d/dx é linear, pois

$$\frac{d}{dx}\big(\alpha f(x) + \beta g(x)\big) = \alpha\frac{df(x)}{dx} + \beta\frac{dg(x)}{dx}.$$

Exemplo 2. O operador integral é linear, pois

$$\int \big(\alpha f(x) + \beta g(x)\big)dx = \alpha\int f(x)dx + \alpha\int g(x)dx.$$

Exemplo 3. O operador $\sqrt{}$ não é linear, pois

$$\sqrt{\alpha f(x) + \beta g(x)} \neq \alpha\sqrt{f(x)} + \beta\sqrt{g(x)}.$$

Um operador linear, que representa uma transformação linear, pode ser representado por uma matriz e fica completamente determinado se conhecermos seu efeito sobre os vetores da base. No $\mathbb{R}^2$, por exemplo, a matriz que representará o operador será uma matriz 2×2, ou seja, uma matriz do tipo

$$\hat{\mathcal{O}} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}.$$

Se quisermos determinar a matriz que representa o operador, basta conhecer o seu efeito sobre os vetores da base. Por exemplo, suponha que a base ortonormal seja $\{|a\rangle, |b\rangle\}$ e que

$$\hat{\mathcal{O}}|a\rangle = |b\rangle \quad \text{e} \quad \hat{\mathcal{O}}|b\rangle = |a\rangle$$

Agora, suponha que a representação dos vetores $|a\rangle$ e $|b\rangle$ sejam dadas por

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |b\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Logo,

$$\hat{\mathcal{O}}|a\rangle = |b\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} a = 0 \\ c = 1 \end{cases}$$

e

$$\hat{\mathcal{O}}|b\rangle = |a\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} b = 1 \\ d = 0 \end{cases}$$

Portanto, a matriz que representa o operador $\hat{\mathcal{O}}$ na base $\{|a\rangle, |b\rangle\}$ é

$$\hat{\mathcal{O}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Dada uma base ortonormal $\{|i\rangle\}$, temos que

O operador $\hat{\mathcal{O}}$ pode ser escrito usando o formalismo braket.

$\hat{\mathcal{O}}|a\rangle = |b\rangle$,

onde os vetores $|a\rangle$ e $|b\rangle$ escritos na base $\{|i\rangle\}$ são dados por

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |b\rangle = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_n \end{pmatrix}$$

Aplicando o operador $\hat{\mathcal{O}}$ no vetor $|a\rangle$, temos

$$\hat{\mathcal{O}}|a\rangle = \begin{pmatrix} \mathcal{O}_{11} & \mathcal{O}_{12} & \cdots & \mathcal{O}_{1n} \\ \mathcal{O}_{21} & \mathcal{O}_{22} & \cdots & \mathcal{O}_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mathcal{O}_{n1} & \mathcal{O}_{n2} & \cdots & \mathcal{O}_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_j \mathcal{O}_{1j}\alpha_j \\ \sum_j \mathcal{O}_{2j}\alpha_j \\ \vdots \\ \sum_j \mathcal{O}_{nj}\alpha_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_n \end{pmatrix} \tag{1}$$

Portanto,

$$\beta_i = \sum_j \mathcal{O}_{ij}\alpha_j. \tag{2}$$

O vetor $|b\rangle$ escrito na base $\{|i\rangle\}$ é dado por

$$|b\rangle = \sum_i \beta_i |i\rangle \tag{3}$$

Usando (2) em (3), obtemos

$$|b\rangle = \hat{\mathcal{O}}|a\rangle = \sum_i \sum_j \mathcal{O}_{ij}\alpha_j\,|i\rangle = \sum_{i,j} \mathcal{O}_{ij}\alpha_j\,|i\rangle \tag{4}$$

Como $|a\rangle = \sum_j \alpha_j\,|j\rangle$, então $\alpha_j = \langle j|a\rangle$. Substituindo α_i em (4), obtemos

$$\hat{\mathcal{O}}|a\rangle = \sum_{i,j} \mathcal{O}_{ij}\langle j|a\rangle\,|i\rangle = \sum_{i,j} \mathcal{O}_{ij}\,|i\rangle\langle j|a\rangle = \underbrace{\left(\sum_{i,j} \mathcal{O}_{ij}\,|i\rangle\langle j|\right)}_{\hat{\mathcal{O}}}|a\rangle. \tag{5}$$

Não se esqueça que $\langle j|a\rangle$ (escalar), e os escalares podem multiplicar os vetores tanto pela direita quanto pela esquerda. Podemos concluímos, portanto, que o operador $\hat{\mathcal{O}}$ na notação braket é dado por

$$\hat{\mathcal{O}} = \sum_{i,j} \mathcal{O}_{ij}\,|i\rangle\langle j|. \tag{6}$$

Esta notação faz sentido, pois $\sum_{i,j} \mathcal{O}_{ij}\,|i\rangle\langle j|$, com entradas $\mathcal{O}_{ij}$, ao ser aplicado a um outro vetor, resulta em um novo vetor. Por exemplo, vamos considerar, por simplicidade, o espaço de dimensão três. Logo,

$$\hat{\mathcal{O}} = \sum_{i,j}^{3} \mathcal{O}_{ij}|i\rangle\langle j|$$

$$= \mathcal{O}_{11}|1\rangle\langle 1| + \mathcal{O}_{12}|1\rangle\langle 2| + \mathcal{O}_{13}|1\rangle\langle 3| + \mathcal{O}_{21}|2\rangle\langle 1| + \mathcal{O}_{22}|2\rangle\langle 2|$$
$$+ \mathcal{O}_{23}|2\rangle\langle 3| + \mathcal{O}_{31}|3\rangle\langle 1| + \mathcal{O}_{32}|3\rangle\langle 2| + \mathcal{O}_{33}|3\rangle\langle 3|$$

$$= \mathcal{O}_{11}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\end{pmatrix} + \mathcal{O}_{12}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\end{pmatrix} + \mathcal{O}_{13}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$+ \mathcal{O}_{21}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\end{pmatrix} + \mathcal{O}_{22}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\end{pmatrix} + \mathcal{O}_{23}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$+ \mathcal{O}_{31}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\end{pmatrix} + \mathcal{O}_{32}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\end{pmatrix} + \mathcal{O}_{33}\begin{pmatrix}0\\0\\3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$= \mathcal{O}_{11}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&0\end{pmatrix} + \mathcal{O}_{12}\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&0\\0&0&0\end{pmatrix} + \mathcal{O}_{13}\begin{pmatrix}0&0&1\\0&0&0\\0&0&0\end{pmatrix} + \mathcal{O}_{21}\begin{pmatrix}0&0&0\\1&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}$$

$$+ \mathcal{O}_{22}\begin{pmatrix}0&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{pmatrix} + \mathcal{O}_{23}\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&0&0\end{pmatrix} + \mathcal{O}_{31}\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&0\\1&0&0\end{pmatrix}$$

$$+ \mathcal{O}_{32}\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&0\\0&1&0\end{pmatrix} + \mathcal{O}_{33}\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix}\mathcal{O}_{11}&\mathcal{O}_{12}&\mathcal{O}_{13}\\\mathcal{O}_{21}&\mathcal{O}_{22}&\mathcal{O}_{23}\\\mathcal{O}_{31}&\mathcal{O}_{32}&\mathcal{O}_{33}\end{pmatrix}$$

que é a representação matricial do operador $\hat{\mathcal{O}}$ na base canônica $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$. Mudando a base muda a forma matricial do operador. Os elementos da matriz que representa o operador $\hat{\mathcal{O}}$, podem ser obtidos multiplicando (6) à esquerda por $\langle m|$ e à direita por $|n\rangle$, obtemos os elementos da matriz que representa o operador $\hat{\mathcal{O}}$:

$$\langle m|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle = \sum_{i,j} \mathcal{O}_{ij}\,\langle m|i\rangle\langle j|n\rangle = \sum_{i,j} \mathcal{O}_{ij}\,\delta_{mi}\delta_{jn} = \mathcal{O}_{mn}. \tag{7}$$

Ou seja, os elementos da matriz que representam o operador são dados por

$$(\mathbf{O})_{mn} = \langle m|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle. \tag{8}$$

Usando a relação (6), vemos claramente que a aplicação do operador sobre um vetor resulta em outro vetor como esperado:

$$\hat{\mathcal{O}}|b\rangle = \sum_{i,j} \mathcal{O}_{ij}\,|i\rangle\langle j|b\rangle = \sum_{i,j} |i\rangle \underbrace{\langle j|b\rangle\mathcal{O}_{ij}}_{número} = \sum_i |i\rangle \left(\underbrace{\sum_j \langle j|b\rangle\mathcal{O}_{ij}}_{número}\right) = \sum_i |i\rangle b_i, \tag{9}$$

onde fizemos

$$\sum_j \langle j|b\rangle\mathcal{O}_{ij} = b_i.$$

O operador $\hat{\mathcal{O}}$ aplicado a um vetor bra $\langle a|$, resulta em outro vetor bra:

$$\langle a|\hat{\mathcal{O}} = \sum_{i,j} \mathcal{O}_{ij}\,\langle a|i\rangle\langle j| = \sum_j \underbrace{\left(\sum_i \mathcal{O}_{ij}\,\langle a|i\rangle\right)}_{número}\langle j| = \sum_j a_j\,\langle j|,$$

onde fizemos

$$a_j = \sum_i \mathcal{O}_{ij} \langle a|i\rangle.$$

Transposto do operador na notação de Dirac

O transposto do operador

$$\hat{\mathcal{O}} = \sum_{i,j} \mathcal{O}_{ij} \, |i\rangle\langle j|$$

é dado por

$$\hat{\mathcal{O}}^T = \sum_{i,j} \mathcal{O}_{j,i} \, |i\rangle\langle j| \text{ ou } \sum_{i,j} \mathcal{O}_{ij} \, |j\rangle\langle i| \tag{10}$$

Na transposição de operadores usando a notação de Dirac, você troca $\mathcal{O}_{ij} \longrightarrow \mathcal{O}_{ji}$ ou você troca $|i\rangle\langle j| \longrightarrow |j\rangle\langle i|$, mas nunca os dois ao mesmo tempo.

Complexo conjugado do operador na notação de Dirac

O ***complexo conjugado*** do operador $\hat{\mathcal{O}}$ é dado por

$$\hat{\mathcal{O}}^* = \sum_{i,j} \mathcal{O}_{ij}^* \, |i\rangle\langle j|. \tag{11}$$

Operador adjunto ou conjugado hermitiano

O *adjunto* ou *conjugado Hermitiano* do operador $\hat{\mathcal{O}}$ é definido por

$$\hat{\mathcal{O}}^\dagger = \sum_{i,j} \mathcal{O}_{ji}^* \, |i\rangle\langle j| = \sum_{i,j} \mathcal{O}_{ij}^* \, |j\rangle\langle i|. \tag{12}$$

Operador hermitiano ou autoadjunto e antihermitiano

Por definição, um operador linear $\hat{\mathcal{O}}$ é ***hermitiano ou autoadjunto*** se o operador for igual ao seu transposto conjugado.

$$\hat{\mathcal{O}} = \hat{\mathcal{O}}^\dagger.$$

Exemplo de operador hermitiano:

a) $\sigma_1 = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

b) $\sigma_2 = \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$

c) $\sigma_3 = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Por outro lado, dizemos que um operador é ***antihermitiano*** se $\hat{\mathcal{O}} = -\hat{\mathcal{O}}^\dagger$.

Exemplos de operadores *antihermitianos*:

a) $\hat{\mathcal{O}} = \begin{pmatrix} -i & 2+i \\ -2+i & i \end{pmatrix}$

Relações úteis

a) $\left(\hat{\mathrm{A}}\hat{\mathrm{B}}\right)^\dagger = \hat{\mathrm{B}}^\dagger\hat{\mathrm{A}}^\dagger$

b) $\left(\hat{\mathrm{A}}|i\rangle\right)^\dagger = \langle i|\hat{\mathrm{A}}^\dagger$

c) Se $\hat{\mathcal{O}} = \hat{\mathcal{O}}^\dagger$ (hermitiano), então $\left(\hat{\mathcal{O}}|a\rangle = |b\rangle\right)^\dagger \longrightarrow \langle a|\hat{\mathcal{O}} = \langle b|$

Mudança de bases

Dado um espaço vetorial, como vimos, sua base não é única. Dadas duas bases $\{|i\rangle\}$ e $\{|\alpha\rangle\}$ de um mesmo espaço vetorial, gostaríamos de saber qual a relação entre as duas. Aqui, vamos representar a primeira base pelas letras latinas e a segunda pelas letras gregas. Suponha que as duas bases sejam ortonormais, ou seja, $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$ e $\langle\alpha|\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}$. Além disso, vamos supor que elas sejam completas, *i.e.*, $\sum_i |i\rangle\langle i| = \mathbb{1}$ e $\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = \mathbb{1}$. Como a base $\{|i\rangle\}$ é completa, então podemos expressão qualquer vetor $|\alpha\rangle$ como combinação linear dos vetores da base $\{|i\rangle\}$, ou seja,

$$|\alpha\rangle = \mathbb{1}|\alpha\rangle = \left(\sum_i |i\rangle\langle i|\right)|\alpha\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\alpha\rangle = \sum_i |i\rangle U_{i\alpha} = \sum_i |i\rangle(\mathbf{U})_{i\alpha} \qquad (13)$$

onde definimos $\langle i|\alpha\rangle \equiv U_{i\alpha} = (\mathbf{U})_{i\alpha}$. Agora, como a base $\{|\alpha\rangle\}$ também é completa, então podemos expressar qualquer vetor da base $\{|i\rangle\}$ como combinação linear dos vetores da base $\{|\alpha\rangle\}$, isto é,

$$\begin{aligned}|i\rangle = \mathbb{1}|i\rangle = \left(\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|\right)|i\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|i\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle i|\alpha\rangle^* = \sum_\alpha |\alpha\rangle U_{i\alpha}^* \\ = \sum_\alpha |\alpha\rangle(\mathbf{U}^\dagger)_{\alpha i}.\end{aligned} \qquad (14)$$

Aqui, fizemos $\langle\alpha|i\rangle = \langle i|\alpha\rangle^* = U_{i\alpha}^* = (\mathbf{U}^\dagger)_{\alpha i}$. Como definimos a matriz $\mathbf{U}$ usando (13), temos que $\langle\alpha|i\rangle \neq U_{\alpha i}$, ou seja, $\langle\alpha|i\rangle = U_{i\alpha}^*$. Usando a ortonormalidade das bases, temos que

$$\delta_{ij} = \langle i|j\rangle = \langle i|\mathbb{1}|j\rangle = \sum_{\alpha} \langle i|\alpha\rangle \langle \alpha|j\rangle = \sum_{\alpha} (\mathbf{U})_{i\alpha} (\mathbf{U}^{\dagger})_{\alpha j} = (\mathbf{U}\mathbf{U}^{\dagger})_{ij}.$$

Portanto, $\mathbb{1} = \mathbf{U}\mathbf{U}^{\dagger}$. Agora, começando com $\delta_{\alpha\beta} = \langle \alpha|\beta\rangle$, temos

$$\delta_{\alpha\beta} = \langle \alpha|\beta\rangle = \langle \alpha|\mathbb{1}|\beta\rangle = \sum_{i} \langle \alpha|i\rangle \langle i|\beta\rangle = \sum_{i} \langle i|\alpha\rangle^{*} \langle i|\beta\rangle = \sum_{i} U_{i\alpha}^{*} U_{i\beta} = \sum_{i} (\mathbf{U}^{\dagger})_{\alpha i} (\mathbf{U})_{i\beta}$$
$$= (\mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{U})_{\alpha\beta}.$$

Concluímos, portanto, que $\mathbb{1} = \mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{U}$. Ou seja, a matriz $\mathbf{U}$ é *unitária*, isto é, $\mathbf{U}^{\dagger} = \mathbf{U}^{-1}$. Este resultado é muito interessante, porque mostra que duas bases ortonormais estão relacionadas por uma transformação unitária de acordo com (13). Os elementos da matriz $\mathbf{U}$ são obtidos fazendo o produto escalar entre os vetores das duas bases: $\langle i|\alpha\rangle = U_{i\alpha} = (\mathbf{U})_{i\alpha}$

Considere novamente o operador $\hat{O}$. Seja a matriz $\mathbf{O}$ a representação do operador $\hat{O}$ na base $\{|i\rangle\}$ e $\mathbf{\Omega}$ a representação do operador na base $\{|\alpha\rangle\}$. Consequentemente, temos

$$\hat{O}|i\rangle = \mathbb{1}\hat{O}|i\rangle = \left(\sum_{j} |j\rangle\langle j|\right)\hat{O}|i\rangle = \sum_{j} |j\rangle\langle j|\hat{O}|i\rangle = \sum_{j} |i\rangle O_{ji} \tag{15}$$

$$\hat{O}|\alpha\rangle = \mathbb{1}\hat{O}|\alpha\rangle = \left(\sum_{\beta} |\beta\rangle\langle \beta|\right)\hat{O}|\alpha\rangle = \sum_{\beta} |\beta\rangle\langle \beta|\hat{O}|\alpha\rangle = \sum_{\beta} |\beta\rangle \Omega_{\beta\alpha} \tag{16}$$

Agora, gostaríamos de saber como estas duas matrizes $\mathbf{\Omega}$ e $\mathbf{O}$ estão relacionadas. Note que um elemento da matriz $\mathbf{\Omega}$ pode ser escrito como $\Omega_{\alpha\beta} = \langle \alpha|\hat{O}|\beta\rangle$. Logo,

$$\Omega_{\alpha\beta} = \langle \alpha|\mathbb{1}\hat{O}\mathbb{1}|\beta\rangle = \langle \alpha| \textstyle\sum_{i} |i\rangle\langle i|\, \hat{O} \textstyle\sum_{j} |j\rangle\langle j|\, |\beta\rangle$$
$$= \sum_{ij} \langle \alpha|i\rangle\langle i|\hat{O}|j\rangle\langle j|\beta\rangle = \sum_{ij} U_{i\alpha}^{*} O_{ij} U_{j\beta} = \sum_{ij} (\mathbf{U})_{i\alpha}^{*} (\mathbf{O})_{ij} (\mathbf{U})_{j\beta}$$

$$\Omega_{\alpha\beta} = \sum_{ij} (\mathbf{U}^{\dagger})_{\alpha i} (\mathbf{O})_{ij} (\mathbf{U})_{j\beta} \tag{17}$$

Em notação matricial, temos

$$\mathbf{\Omega} = \mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{O}\mathbf{U} \tag{18}$$

Multiplicando (18) à esquerdo por $\mathbf{U}$ e à direita por $\mathbf{U}^{\dagger}$, obtemos

$$\mathbf{O} = \mathbf{U}\mathbf{\Omega}\mathbf{U}^{\dagger} \tag{19}$$

Portanto, as duas matrizes $\mathbf{O}$ e $\mathbf{\Omega}$ estão relacionadas por uma *transformação unitária*. Este resultado é muito importante na quântica, pois sempre podemos encontrar uma transformação unitária que transforma um operador hermitiano não diagonal na base $\{|i\rangle\}$ em um operador hermitiano diagonal na base $\{|\alpha\rangle\}$, ou seja,

$$\Omega_{\alpha\beta} = \omega_\alpha \delta_{\alpha\beta} \tag{20}$$

$$\mathbf{\Omega} = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{O} \mathbf{U} = \boldsymbol{\omega} = \begin{pmatrix} \omega_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \omega_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \omega_n \end{pmatrix}$$

1. Encontre o *hermitiano conjugado* ou adjunto do operador constante $a + bi$.

Resp.: Se $\hat{O} = a + bi$ com $a, b \in \mathbb{R}$, então $\hat{O}^\dagger = a - bi$

2. Encontre o conjugado hermitiano do operador $\partial/\partial x$.

$$\left\langle \phi \middle| \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} dx = [\phi^*(x)\varphi(x)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \phi^*(x)}{\partial x} \varphi(x) dx = \left\langle -\frac{\partial \varphi}{\partial x} \middle| \phi \right\rangle.$$

Na obtenção da segunda desigualdade, usamos integração por parte. O termo $[\phi^*(x)\varphi(x)]_{-\infty}^{\infty}$ é nulo, pois as funções de onda $\phi(x)$ e $\varphi(x)$ são nulas no infinito. Portanto, o conjugado hermitiano de $\partial/\partial x$ é $-\partial/\partial x$.

3. Encontre o conjugado hermitiano do operador

$$\hat{O} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -i & 1 \end{pmatrix}.$$

$$\hat{O}^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

4. Mostre que o operador identidade é hermitiano.

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{I}^\dagger.$$

5. Mostre que o operador dado a seguir é antihermitiano.

$$\hat{O} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$$

$$\hat{O} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \Longrightarrow \hat{O}^\dagger = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = -\hat{O}.$$

6. Mostre que o operador momento $\hat{p}_x$ é hermitiano.

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

Sejam $\varphi(x)$ e $\phi(x)$ dois vetores de um espaço vetorial linear:

$$\left\langle -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi(x)\middle|\phi(x)\right\rangle = \left\langle\varphi(x)\middle|\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^{\dagger}\phi(x)\right\rangle = \left\langle\varphi(x)\middle|\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^{\dagger}(-i\hbar)^{\dagger}\phi(x)\right\rangle$$

$$= \left\langle\varphi(x)\middle|\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^{\dagger} i\hbar\phi(x)\right\rangle = \left\langle\varphi(x)\middle|-\frac{\partial}{\partial x}i\hbar\phi(x)\right\rangle = \left\langle\varphi(x)\middle|-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\phi(x)\right\rangle$$

Portanto, $\hat{p}^{\dagger} = \hat{p}$. Logo, $\hat{p}$ é hermitiano.

7. Mostre que o operador $\partial^2/\partial x^2$ é hermitiano.

$$\left\langle\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x)\middle|\phi(x)\right\rangle = \left\langle\varphi(x)\middle|\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)^{\dagger}\phi(x)\right\rangle = \left\langle\varphi(x)\middle|\left(\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}\right)^{\dagger}\phi(x)\right\rangle$$

$$= \left\langle\varphi(x)\middle|-\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)\phi(x)\right\rangle = \left\langle\varphi(x)\middle|\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x)\right\rangle.$$

8. Mostre que o operador $\widehat{\mathcal{H}}$ é hermitiano.

$$\langle\widehat{\mathcal{H}}\varphi(x)|\phi(x)\rangle = \left\langle\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\hat{V}\right]\varphi(x)\middle|\phi(x)\right\rangle = \left\langle\varphi(x)\middle|\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\hat{V}\right]^{\dagger}\phi(x)\right\rangle$$

$$= \left\langle\varphi(x)\middle|\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)^{\dagger}+\left(\hat{V}\right)^{\dagger}\right]\phi(x)\right\rangle = \left\langle\varphi(x)\middle|\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\hat{V}\right]\phi(x)\right\rangle$$

$$= \langle\varphi(x)|\widehat{\mathcal{H}}\phi(x)\rangle.$$

Portanto, $\widehat{\mathcal{H}} = \widehat{\mathcal{H}}^{\dagger}$.nt

Autovalores e autovetores

Vimos que quando um operador linear atua em um vetor produz outro vetor no mesmo espaço vetorial: $\hat{O}: E \longrightarrow E$ ou $\hat{O}: E^* \longrightarrow E^*$. Isto é,

$$\hat{O}|a\rangle = |b\rangle$$
$$\langle a|\hat{O}^{\dagger} = \langle b| \tag{21}$$

Existe um caso especial em que o efeito do operador sobre o vetor é apenas multiplicar o vetor por uma constante, ou seja, o operador apenas estica ou encolhe o vetor:

$$\hat{O}|\alpha\rangle = \omega_\alpha|\alpha\rangle \tag{22}$$

$$\langle\alpha|\hat{O}^\dagger = \omega_\alpha^*\langle\alpha| \tag{23}$$

Neste caso, chamamos as constantes ω_α e ω_α^* de *autovalores* e os vetores $|\alpha\rangle$ e $\langle\alpha|$ de *autovetores*.

O valor esperado de um operador hermitiano é real.

Seja um operador hemitiano e $\varphi(x)$ uma função complexa. O valor esperado do operador $\hat{O}$ é dado por $\langle\varphi(x)|\hat{O}|\varphi(x)\rangle$. Como $\hat{O}$ é hermitiano, então vale a igualdade $\hat{O} = \hat{O}^\dagger$. Logo,

$$\langle\varphi(x)|\hat{O}|\varphi(x)\rangle = \langle\varphi(x)|\hat{O}^\dagger|\varphi(x)\rangle^* = \langle\varphi(x)|\hat{O}|\varphi(x)\rangle^*.$$

Portanto, o valor esperado ou valor médio é real.

Os autovalores de um operador hermitiano são reais

Seja $\hat{O}$ um operador hermitiano, isto é, $\hat{O} = \hat{O}^\dagger$. Logo, multiplicando (22) à esquerda por $\langle\alpha|$ e multiplicando (23) à direita por $|\alpha\rangle$ e subtraindo a segunda equação da primeira, obtemos

$$\begin{array}{rl} & \langle\alpha|\hat{O}|\alpha\rangle = \omega_\alpha\langle\alpha|\alpha\rangle \\ - & \underline{\langle\alpha|\hat{O}^\dagger|\alpha\rangle = \omega_\alpha^*\langle\alpha|\alpha\rangle} \\ & 0 = (\omega_\alpha - \omega_\alpha^*)\langle\alpha|\alpha\rangle \end{array} \tag{24}$$

De acordo com os postulados do produto interno, temos que $\langle\alpha|\alpha\rangle > 0$. Portanto, devemos ter

$$\omega_\alpha - \omega_\alpha^* = 0 \Longrightarrow \omega_\alpha = \omega_\alpha^*$$

Os autovetores de um operador hermitiano são ortogonais

Sejam $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ dois autovetores de um operador hermitiano $\hat{O}$ ($\hat{O} = \hat{O}^\dagger$). Logo,

$$\hat{O}|\alpha\rangle = \omega_\alpha|\alpha\rangle \tag{25}$$

$$\langle\beta|\hat{O}^\dagger = \omega_\beta^*\langle\beta| \tag{26}$$

Multiplicando (25) à esquerda por $\langle\beta|$ e multiplicando (26) à direita por $|\alpha\rangle$ e subtraindo a segunda da primeira, obtemos

$$\begin{array}{rl} & \langle\beta|\hat{O}|\alpha\rangle = \omega_\alpha\langle\beta|\alpha\rangle \\ - & \underline{\langle\beta|\hat{O}^\dagger|\alpha\rangle = \omega_\beta^*\langle\beta|\alpha\rangle} \end{array}$$

$$0 \; = \left(\omega_\alpha - \omega_\beta^*\right)\langle\beta|\alpha\rangle$$

Ou seja,

$$\left(\omega_\alpha - \omega_\beta\right)\langle\beta|\alpha\rangle = 0. \tag{27}$$

Aqui usamos o fato de que $\omega_\beta^* = \omega_\beta$, pois os autovalores de operadores hermitianos são reais.

A partir de (27) concluímos que $\langle\beta|\alpha\rangle = 0$ (ortogonais), se $\omega_\alpha \neq \omega_\beta$ (autovalores não degenerados)