

FI 001 – Mecânica Quântica I – Lista 1

Soluções

Questão 01 — Projetores

(P.7.2 e P.7.3, Messiah; Ex. 9.11 e Ex. 9.12, Merzbacher)

Um **projetor** é um operador P que satisfaz

$$P^\dagger = P \quad (\text{hermitiano}), \quad P^2 = P \quad (\text{idempotente}).$$

Todos os itens abaixo seguem apenas dessas duas propriedades.

a) Projetores são definidos positivos

Para qualquer vetor $|u\rangle$ do espaço de Hilbert,

$$\langle u|P|u\rangle = \langle u|P^2|u\rangle = \langle u|P^\dagger P|u\rangle = (P|u\rangle)^\dagger (P|u\rangle) = \|P|u\rangle\|^2 \geq 0,$$

onde usamos $P = P^2$ na primeira igualdade e $P = P^\dagger$ na segunda. Como a norma de qualquer vetor é não negativa, $\langle u|P|u\rangle \geq 0$ para todo $|u\rangle$, isto é, P é definido positivo. $\square$

b) Projetor não possui inverso (dimensão > 1)

Suponha, por absurdo, que P^{-1} exista. Multiplicando a relação de idempotência à esquerda por P^{-1} ,

$$P^{-1}P^2 = P^{-1}P \implies P = \mathbb{1}.$$

Ou seja, o único projetor invertível é a identidade. Um projetor sobre um subespaço próprio $\mathcal{E}$ — que existe sempre que a dimensão do espaço é maior que 1 — não é a identidade: tomando $|v\rangle \neq 0$ no complemento ortogonal $\mathcal{E}^\perp$, temos

$$P|v\rangle = 0 = P|0\rangle,$$

dois vetores distintos com a mesma imagem. Logo P não é injetivo e, portanto, não possui inverso. $\square$

c) $\sum_i P_i$ é projetor $\iff \sum_i \langle u|P_i|u\rangle \leq \langle u|u\rangle$

Sejam $P_1, \dots, P_K$ projetores e defina $P \equiv \sum_{i=1}^K P_i$. Note que $P^\dagger = P$ automaticamente (soma de hermitianos); a questão é a idempotência.

Necessidade ($\Rightarrow$). Se P é projetor, então, usando o item (a) e a desigualdade de Cauchy–Schwarz,

$$\|P|u\rangle\|^2 = \langle u|P|u\rangle = \langle u|Pu\rangle \leq \|u\| \|P|u\rangle\| \implies \|P|u\rangle\| \leq \|u\|$$

(na implicação, dividimos por $\|P|u\rangle\|$ quando $P|u\rangle \neq 0$; se $P|u\rangle = 0$, a desigualdade é trivial). Logo

$$\sum_i \langle u|P_i|u\rangle = \langle u|P|u\rangle = \|P|u\rangle\|^2 \leq \|u\|^2 = \langle u|u\rangle.$$

Suficiência ($\Leftarrow$). Suponha $\sum_i \langle u|P_i|u \rangle \leq \langle u|u \rangle$ para todo $|u\rangle$. Tome $|u\rangle$ qualquer na imagem de P_j , isto é, $P_j|u\rangle = |u\rangle$. Então

$$\langle u|u \rangle + \sum_{i \neq j} \langle u|P_i|u \rangle \leq \langle u|u \rangle \implies \sum_{i \neq j} \langle u|P_i|u \rangle \leq 0.$$

Pelo item (a), cada termo é ≥ 0 ; logo todos se anulam:

$$\langle u|P_i|u \rangle = \|P_i|u\rangle\|^2 = 0 \implies P_i|u\rangle = 0 \quad (i \neq j).$$

Como isso vale para qualquer vetor da imagem de P_j , concluímos que os projetores são *mutuamente ortogonais*,

$$P_i P_j = 0 \quad (i \neq j),$$

e portanto

$$P^2 = \sum_{i,j} P_i P_j = \sum_i P_i^2 = \sum_i P_i = P,$$

isto é, P é projetor. □

d) $f(A) = 0$ e $P_n = g_n(A)/g_n(a_n)$

A é um observável com N autovalores distintos $a_1, \dots, a_N$; seus autovetores $\{|a_m, r\rangle\}$ (com r indexando a eventual degenerescência) formam uma base completa do espaço. Define-se

$$f(A) \equiv \prod_{k=1}^N (A - a_k), \quad g_n(A) \equiv \prod_{k \neq n} (A - a_k), \quad f(A) = (A - a_n) g_n(A).$$

$f(A) = 0$. Os fatores $(A - a_k)$ comutam entre si (são polinômios em A). Aplicando $f(A)$ a um autovetor qualquer,

$$f(A)|a_m, r\rangle = \prod_{k=1}^N (a_m - a_k) |a_m, r\rangle = 0,$$

pois o fator $k = m$ anula o produto. Um operador linear que anula todos os vetores de uma base completa é o operador nulo; logo $f(A) = 0$. □

Fórmula do projetor. Agindo com $g_n(A)$ sobre a mesma base,

$$g_n(A)|a_m, r\rangle = \prod_{k \neq n} (a_m - a_k) |a_m, r\rangle = \begin{cases} g_n(a_n) |a_n, r\rangle, & m = n, \\ 0, & m \neq n, \end{cases}$$

pois, para $m \neq n$, o produto contém o fator $k = m$, que o anula; e, para $m = n$,

$$g_n(a_n) = \prod_{k \neq n} (a_n - a_k) \neq 0,$$

já que os autovalores são todos distintos. Portanto

$$\frac{g_n(A)}{g_n(a_n)} |a_m, r\rangle = \delta_{nm} |a_m, r\rangle,$$

que é exatamente a ação do projetor sobre o autoespaço de a_n . Como os dois operadores coincidem sobre uma base completa, são iguais:

$$P_n = \frac{g_n(A)}{g_n(a_n)}$$

Verificação de consistência: P_n é hermitiano (polinômio com coeficientes reais no operador hermitiano A) e a ação diagonal acima dá $P_n P_m = \delta_{nm} P_n$ — de fato é um projetor. □

Questão 02 — Operadores definidos positivos

(*Messiah*, Quantum Mechanics, Cap. VII, problemas P.7.7, P.7.8 e P.7.9)

Um operador hermitiano H diz-se *definido positivo* quando

$$\langle u|H|u\rangle \geq 0 \quad \text{para todo } |u\rangle.$$

Como H é hermitiano, $\langle u|H|u\rangle = \langle u|H|u\rangle^*$ é sempre real, de modo que a condição faz sentido. Note ainda a relação de hermiticidade que usaremos repetidamente:

$$\langle v|H|u\rangle = \langle u|H^\dagger|v\rangle^* = \langle u|H|v\rangle^*.$$

a) Desigualdade de Schwarz generalizada e positividade do traço

A desigualdade. Fixados $|u\rangle$, $|v\rangle$ e $\lambda \in \mathbb{C}$ arbitrário, considere $|w\rangle = |u\rangle + \lambda|v\rangle$. A positividade de H aplicada a $|w\rangle$ dá

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle w|H|w\rangle = \langle u|H|u\rangle + \lambda \langle u|H|v\rangle + \lambda^* \langle v|H|u\rangle + |\lambda|^2 \langle v|H|v\rangle \\ &= \langle u|H|u\rangle + 2 \operatorname{Re}[\lambda \langle u|H|v\rangle] + |\lambda|^2 \langle v|H|v\rangle, \end{aligned}$$

onde usamos $\lambda^* \langle v|H|u\rangle = (\lambda \langle u|H|v\rangle)^*$.

Caso $\langle v|H|v\rangle > 0$. Escolhendo $\lambda = -\langle u|H|v\rangle^* / \langle v|H|v\rangle$, obtém-se

$$0 \leq \langle u|H|u\rangle - 2 \frac{|\langle u|H|v\rangle|^2}{\langle v|H|v\rangle} + \frac{|\langle u|H|v\rangle|^2}{\langle v|H|v\rangle} = \langle u|H|u\rangle - \frac{|\langle u|H|v\rangle|^2}{\langle v|H|v\rangle},$$

e, multiplicando por $\langle v|H|v\rangle > 0$,

$$|\langle u|H|v\rangle|^2 \leq \langle u|H|u\rangle \langle v|H|v\rangle.$$

Caso $\langle v|H|v\rangle = 0$. Tomando $\lambda = -t \langle u|H|v\rangle^*$ com $t > 0$, a desigualdade acima reduz-se a

$$0 \leq \langle u|H|u\rangle - 2t |\langle u|H|v\rangle|^2 \quad \text{para todo } t > 0,$$

o que só é possível se $\langle u|H|v\rangle = 0$. Ambos os lados da desigualdade se anulam, e ela vale (com igualdade). Isso conclui a demonstração da desigualdade em todos os casos.

$\langle v|H|v\rangle = 0 \Rightarrow H|v\rangle = 0$. No caso $\langle v|H|v\rangle = 0$ acabamos de mostrar que $\langle u|H|v\rangle = 0$ para *todo* $|u\rangle$. Em particular, escolhendo $|u\rangle = H|v\rangle$,

$$0 = \langle u|H|v\rangle = \|H|v\rangle\|^2,$$

e um ket de norma nula é o ket nulo: $H|v\rangle = 0$.

Tr $H \geq 0$ e o caso de igualdade. Seja $\{|n\rangle\}$ uma base ortonormal qualquer (o traço independe da base escolhida). Então

$$\operatorname{Tr} H = \sum_n \langle n|H|n\rangle \geq 0,$$

pois cada parcela é não negativa. Se $\operatorname{Tr} H = 0$, uma soma de termos não negativos que se anula tem todas as parcelas nulas: $\langle n|H|n\rangle = 0$ para todo n , e o resultado anterior dá $H|n\rangle = 0$ para todo n . Como todo ket se escreve $|u\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$, segue $H|u\rangle = \sum_n c_n H|n\rangle = 0$ para todo $|u\rangle$, isto é, $H = 0$. $\square$

b) $\text{Tr}(HK) \geq 0$ para observáveis H, K definidos positivos

Sendo K um observável, ele admite um sistema ortonormal *completo* de autovetores $\{|\kappa_n\rangle\}$,

$$K|\kappa_n\rangle = k_n|\kappa_n\rangle, \quad \langle\kappa_m|\kappa_n\rangle = \delta_{mn},$$

com autovalores reais. A positividade de K implica

$$k_n = \langle\kappa_n|K|\kappa_n\rangle \geq 0.$$

Calculando o traço nessa base,

$$\text{Tr}(HK) = \sum_n \langle\kappa_n|HK|\kappa_n\rangle = \sum_n k_n \langle\kappa_n|H|\kappa_n\rangle \geq 0,$$

pois cada parcela é o produto de dois números não negativos ($k_n \geq 0$ e $\langle\kappa_n|H|\kappa_n\rangle \geq 0$).

Se $\text{Tr}(HK) = 0$, todas as parcelas se anulam: $k_n \langle\kappa_n|H|\kappa_n\rangle = 0$ para todo n . Há dois casos:

- se $k_n = 0$, então $K|\kappa_n\rangle = 0$ e portanto $HK|\kappa_n\rangle = 0$;
- se $k_n > 0$, então $\langle\kappa_n|H|\kappa_n\rangle = 0$ e, pelo item (a), $H|\kappa_n\rangle = 0$; logo $HK|\kappa_n\rangle = k_n H|\kappa_n\rangle = 0$.

Em ambos os casos HK anula todos os vetores de uma base completa e, por linearidade, anula qualquer ket: $HK = 0$. $\square$

c) O operador $A^\dagger A$

Hermiticidade e positividade. Para qualquer operador linear A ,

$$(A^\dagger A)^\dagger = A^\dagger (A^\dagger)^\dagger = A^\dagger A,$$

logo $A^\dagger A$ é hermitiano. Além disso, para todo $|u\rangle$, pondo $|w\rangle = A|u\rangle$,

$$\langle u|A^\dagger A|u\rangle = \langle w|w\rangle = \|A|u\rangle\|^2 \geq 0,$$

de modo que $A^\dagger A$ é definido positivo.

O traço numa representação arbitrária. Seja $\{|n\rangle\}$ a base ortonormal de uma representação qualquer e $A_{mn} \equiv \langle m|A|n\rangle$ a matriz de A nessa representação. Inserindo a relação de fechamento $\sum_m |m\rangle\langle m| = \mathbb{1}$,

$$\text{Tr}(A^\dagger A) = \sum_n \langle n|A^\dagger A|n\rangle = \sum_{n,m} \langle n|A^\dagger|m\rangle \langle m|A|n\rangle = \sum_{m,n} \langle m|A|n\rangle^* \langle m|A|n\rangle = \sum_{m,n} |A_{mn}|^2,$$

onde usamos $\langle n|A^\dagger|m\rangle = \langle m|A|n\rangle^*$. O traço de $A^\dagger A$ é, portanto, a soma dos quadrados dos módulos de *todos* os elementos de matriz de A , em qualquer representação.

Consequências. Sendo soma de termos não negativos, $\text{Tr}(A^\dagger A) \geq 0$ — em acordo com o item (a), já que $A^\dagger A$ é hermitiano definido positivo. Se $\text{Tr}(A^\dagger A) = 0$, então $|A_{mn}|^2 = 0$ para todos os pares (m, n) , isto é, todos os elementos de matriz de A se anulam. Como

$$A = \sum_{m,n} A_{mn} |m\rangle\langle n|,$$

segue $A = 0$. (Equivalentemente: pelo item (a), $\text{Tr}(A^\dagger A) = 0$ implica $A^\dagger A = 0$, donde $\|A|u\rangle\|^2 = \langle u|A^\dagger A|u\rangle = 0$ para todo $|u\rangle$, ou seja, $A = 0$.) $\square$

Questão 03 — Transformações de representação

(*Messiah*, Quantum Mechanics, Cap. VII, problema P.7.5)

Preliminares. Sejam $\{|n\rangle\}$ (representação antiga) e $\{|\tilde{n}\rangle\}$ (representação nova) duas bases ortonormais completas do mesmo espaço. A matriz de transformação S tem elementos

$$S_{mn} = \langle \tilde{m} | n \rangle.$$

Pelas relações de fechamento e ortonormalidade das duas bases, S é unitária:

$$(SS^\dagger)_{mn} = \sum_k \langle \tilde{m} | k \rangle \langle k | \tilde{n} \rangle = \langle \tilde{m} | \tilde{n} \rangle = \delta_{mn}, \quad (S^\dagger S)_{mn} = \sum_k \langle m | \tilde{k} \rangle \langle \tilde{k} | n \rangle = \langle m | n \rangle = \delta_{mn},$$

isto é, $S^{-1} = S^\dagger$. A matriz A de um operador transforma-se por semelhança:

$$A'_{mn} = \langle \tilde{m} | A | \tilde{n} \rangle = \sum_{k,l} \langle \tilde{m} | k \rangle \langle k | A | l \rangle \langle l | \tilde{n} \rangle = (SAS^\dagger)_{mn}, \quad \text{ou seja,} \quad A' = SAS^\dagger = SAS^{-1}.$$

Registramos duas identidades da unitariedade, usadas adiante:

$$(S^\dagger)^* = S^T, \quad (S^*)^{-1} = (S^{-1})^* = (S^\dagger)^* = S^T.$$

Note ainda que a substituição $|\tilde{n}\rangle \mapsto e^{i\alpha} |\tilde{n}\rangle$ (mesma fase para todos os vetores da base nova) troca S por $e^{-i\alpha} S$ sem alterar a transformação $A \mapsto SAS^\dagger$: a matriz de transformação é definida apenas a menos de uma fase global.

Lema. Se uma matriz T comuta com todas as matrizes, então $T = c \mathbb{1}$.

De fato, seja $E^{(ij)}$ a matriz com elementos $(E^{(ij)})_{kl} = \delta_{ik} \delta_{jl}$ (na linguagem de operadores, $|i\rangle\langle j|$). Então

$$(TE^{(ij)})_{kl} = T_{ki} \delta_{jl}, \quad (E^{(ij)}T)_{kl} = \delta_{ik} T_{jl}.$$

Igualando com $l = j$: $T_{ki} = \delta_{ik} T_{jj}$. Para $k \neq i$ isso dá $T_{ki} = 0$; para $k = i$ dá $T_{ii} = T_{jj}$ para quaisquer i, j . Logo T é diagonal com todos os elementos diagonais iguais a um mesmo número c : $T = c \mathbb{1}$. $\square$

a) Conservação da conjugação complexa $\iff S$ real

A conjugação complexa é uma operação sobre *matrizes*, definida em relação a uma representação. Dizemos que a transformação *conserva a conjugação* quando, para todo operador de matriz A na representação antiga, o operador cuja matriz antiga é A^* tem matriz nova $(A')^*$; em símbolos,

$$(A^*)' = (A')^* \quad \text{para toda matriz } A.$$

Calculemos os dois lados:

$$(A^*)' = S A^* S^\dagger, \quad (A')^* = (SAS^\dagger)^* = S^* A^* (S^\dagger)^* = S^* A^* S^T.$$

Como A^* percorre todas as matrizes quando A o faz, a condição equivale a

$$S M S^\dagger = S^* M S^T \quad \text{para toda matriz } M. \quad (*)$$

Necessidade. Multiplicando (*) à esquerda por $(S^*)^{-1} = S^T$ e à direita por $(S^\dagger)^{-1} = S$, obtém-se

$$S^T S M = M S^T S \quad \text{para toda } M.$$

Pelo Lema, $S^T S = c \mathbb{1}$, ou seja, $S^T = c S^{-1} = c S^\dagger$. Transpondo esta última igualdade, $S = c (S^\dagger)^T = c S^*$; conjugando-a, $S^* = c^* S$. Combinando, $S = c c^* S$, donde $|c|^2 = 1$. Escrevendo $c = e^{2i\alpha}$, a relação $S = e^{2i\alpha} S^*$ equivale a

$$e^{-i\alpha} S = (e^{-i\alpha} S)^*,$$

isto é, $R \equiv e^{-i\alpha} S$ é uma matriz *real* (e unitária, portanto ortogonal real). Como S e R diferem por uma fase global e geram a mesma transformação, $R A R^\dagger = S A S^\dagger$, a matriz de transformação pode sempre ser escolhida real: a condição é necessária.

Suficiência. Se S é real, então $S^* = S$ e $S^\dagger = S^T$, logo, para toda A ,

$$(A')^* = S^* A^* S^T = S A^* S^\dagger = (A^*)'.$$

A transformação conserva a conjugação complexa. □

b) Conservação da transposição $\iff S$ ortogonal

Analogamente, a transformação *conserva a transposição* quando

$$(A^T)' = (A')^T \quad \text{para toda matriz } A.$$

Calculando os dois lados:

$$(A^T)' = S A^T S^\dagger, \quad (A')^T = (S A S^\dagger)^T = (S^\dagger)^T A^T S^T = S^* A^T S^T.$$

Como A^T percorre todas as matrizes quando A o faz, a condição é exatamente a mesma equação (*) do item (a). Isso não é acidente: toda transformação unitária conserva automaticamente a conjugação *hermitiana*,

$$(A^\dagger)' = S A^\dagger S^\dagger = (S A S^\dagger)^\dagger = (A')^\dagger,$$

e, como $A^T = (A^\dagger)^*$, conservar a transposição equivale a conservar a conjugação complexa.

Necessidade. Como no item (a), (*) implica $S^T S = c \mathbb{1}$ com $c = e^{2i\alpha}$. Usando a liberdade de fase global, substituímos S por $\tilde{S} = e^{-i\alpha} S$ (mesma transformação); então

$$\tilde{S}^T \tilde{S} = e^{-2i\alpha} S^T S = e^{-2i\alpha} e^{2i\alpha} \mathbb{1} = \mathbb{1},$$

isto é, a matriz de transformação pode sempre ser escolhida *ortogonal*: $S^T S = \mathbb{1}$, ou $S^T = S^{-1}$.

Suficiência. Se S é ortogonal, $S^T = S^{-1} = S^\dagger$; conjugando esta igualdade e transpondo, segue $S^* = S$. Então, para toda A ,

$$(A')^T = S^* A^T S^T = S A^T S^\dagger = (A^T)'.$$

A transformação conserva a transposição. □

Observação. Para uma matriz *unitária*, ser real e ser ortogonal são condições equivalentes: se S é real e unitária, $S^\dagger = S^T = S^{-1}$; se S é ortogonal e unitária, $S^T = S^{-1} = S^\dagger$ implica $S^* = S$. Isso é coerente com a equivalência, demonstrada acima, entre conservar a conjugação complexa e conservar a transposição.

Questão 04 — Álgebra de comutadores

(Ex. 3.12, Ex. 3.15, Ex. 3.16 e Ex. 10.7, Merzbacher)

Ao longo da questão, $[A, B] \equiv AB - BA$, e usaremos repetidamente a **identidade de Leibniz**, que se verifica por expansão direta:

$$[A, BC] = ABC - BCA = (AB - BA)C + B(AC - CA) = [A, B]C + B[A, C].$$

Ela mostra que $[A, \cdot]$ age sobre produtos como uma *derivação* — daí a semelhança com a diferenciação que aparecerá abaixo. Todas as séries de operadores são entendidas termo a termo (séries formais; para operadores limitados, convergem em norma).

a) $[A, B^n] = nB^{n-1}[A, B]$ e $[p_x, f(x)]$

Hipótese: A e B comutam ambos com seu comutador,

$$[A, [A, B]] = 0, \quad [B, [A, B]] = 0.$$

Primeira identidade. Indução em n . Para $n = 1$ a afirmação é trivial: $[A, B^1] = 1 \cdot B^0[A, B]$. Suponha $[A, B^n] = nB^{n-1}[A, B]$. Pela identidade de Leibniz,

$$[A, B^{n+1}] = [A, B^n B] = [A, B^n]B + B^n[A, B] = nB^{n-1}[A, B]B + B^n[A, B].$$

Como B comuta com $[A, B]$, podemos trocar $[A, B]B = B[A, B]$ no primeiro termo:

$$[A, B^{n+1}] = nB^n[A, B] + B^n[A, B] = (n+1)B^n[A, B],$$

o que fecha a indução. Note que $B^n \mapsto nB^{n-1}[A, B]$ é formalmente a regra $dB^n/dB = nB^{n-1}$, com $[A, B]$ no papel de “derivada de B ”.

Segunda identidade. A hipótese é simétrica na troca $A \leftrightarrow B$; aplicando a primeira identidade com os papéis trocados e usando $[B, A] = -[A, B]$,

$$[A^n, B] = -[B, A^n] = -nA^{n-1}[B, A] = nA^{n-1}[A, B]. \quad \square$$

Caso especial $A = x$, $B = p_x$. Aqui $[x, p_x] = i\hbar \mathbb{1}$, que é múltiplo da identidade e portanto comuta com qualquer operador: a hipótese está satisfeita. As duas identidades dão imediatamente

$$[x, p_x^n] = i\hbar n p_x^{n-1}, \quad [x^n, p_x] = i\hbar n x^{n-1}.$$

Comutador $[p_x, f(x)]$. Seja f expansível em série de potências do operador x ,

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n.$$

Pela linearidade do comutador e pelo resultado anterior,

$$[p_x, f(x)] = \sum_{n=0}^{\infty} c_n [p_x, x^n] = - \sum_{n=0}^{\infty} c_n [x^n, p_x] = -i\hbar \sum_{n=1}^{\infty} n c_n x^{n-1}$$

(o termo $n = 0$ não contribui). A série restante é exatamente a derivada formal de f avaliada no operador x ; portanto

$$[p_x, f(x)] = -i\hbar \frac{df}{dx} \mathbb{1}$$

onde $df/dx = \sum_n n c_n x^{n-1}$, entendido como o operador de multiplicação por $f'(x)$. $\square$

b) $[A, B] = \gamma B \implies e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} = e^{\lambda \gamma} B$

Defina

$$F(\lambda) \equiv e^{\lambda A} B e^{-\lambda A}.$$

Como $de^{\lambda A}/d\lambda = A e^{\lambda A}$ e $de^{-\lambda A}/d\lambda = -e^{-\lambda A} A$,

$$\frac{dF}{d\lambda} = A e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} - e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} A = e^{\lambda A} (AB - BA) e^{-\lambda A} = e^{\lambda A} [A, B] e^{-\lambda A} = \gamma F(\lambda),$$

onde na última passagem usamos $[A, B] = \gamma B$. Para resolver a equação com rigor, defina $K(\lambda) \equiv e^{-\gamma \lambda} F(\lambda)$ ($e^{-\gamma \lambda}$ é um escalar). Então

$$\frac{dK}{d\lambda} = -\gamma e^{-\gamma \lambda} F + e^{-\gamma \lambda} \gamma F = 0,$$

logo $K(\lambda) = K(0) = F(0) = B$ para todo λ , isto é,

$$\boxed{e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} = e^{\lambda \gamma} B} \quad \square$$

c) Fórmula de Baker–Campbell–Hausdorff–Glauber

Lema (Hadamard). Para operadores quaisquer A e B , defina os comutadores aninhados

$$B_0 \equiv B, \quad B_{n+1} \equiv [A, B_n],$$

isto é, $B_1 = [A, B]$, $B_2 = [A, [A, B]]$ etc. Afirmamos que

$$e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} B_n = B + \lambda [A, B] + \frac{\lambda^2}{2!} [A, [A, B]] + \dots$$

De fato, seja $F(\lambda) = e^{\lambda A} B e^{-\lambda A}$. O mesmo cálculo do item (b) dá $F'(\lambda) = e^{\lambda A} [A, B] e^{-\lambda A}$ e, por indução, cada nova derivada insere mais um comutador com A :

$$F^{(n)}(\lambda) = e^{\lambda A} B_n e^{-\lambda A} \implies F^{(n)}(0) = B_n.$$

A série de Taylor de F em $\lambda = 0$ é então a afirmada.

Equação diferencial para $G(\lambda) = e^{\lambda A} e^{\lambda B}$. Derivando o produto,

$$\frac{dG}{d\lambda} = A e^{\lambda A} e^{\lambda B} + e^{\lambda A} B e^{\lambda B} = A G + (e^{\lambda A} B e^{-\lambda A}) e^{\lambda A} e^{\lambda B} = (A + e^{\lambda A} B e^{-\lambda A}) G,$$

onde inserimos $\mathbb{1} = e^{-\lambda A} e^{\lambda A}$ entre B e $e^{\lambda B}$. Usando o lema de Hadamard,

$$\boxed{\frac{dG}{d\lambda} = \left(A + B + \frac{\lambda}{1!} [A, B] + \frac{\lambda^2}{2!} [A, [A, B]] + \dots \right) G}$$

Caso $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$. Escreva $C \equiv [A, B]$. Todos os termos com $n \geq 2$ da série se anulam ($B_2 = [A, C] = 0$, e daí em diante), restando

$$\frac{dG}{d\lambda} = (A + B + \lambda C) G, \quad G(0) = \mathbb{1}.$$

Candidata a solução:

$$H(\lambda) \equiv e^{M(\lambda)}, \quad M(\lambda) \equiv \lambda(A + B) + \frac{\lambda^2}{2} C.$$

Como A e B comutam com C , também $[A + B, C] = 0$, e portanto $M(\lambda)$ comuta com sua derivada $M'(\lambda) = (A + B) + \lambda C$:

$$[M(\lambda), M'(\lambda)] = \lambda^2[A + B, C] + \frac{\lambda^2}{2}[C, A + B] = 0.$$

Nessa situação vale a regra usual de derivação da exponencial: termo a termo,

$$\frac{d}{d\lambda} M(\lambda)^n = \sum_{k=0}^{n-1} M^k M' M^{n-1-k} = n M' M^{n-1} \implies \frac{dH}{d\lambda} = M'(\lambda) H(\lambda) = (A + B + \lambda C) H.$$

Assim G e H satisfazem a mesma equação de primeira ordem com a mesma condição inicial $H(0) = \mathbf{1}$. A solução é única: como $H^{-1} = e^{-M(\lambda)}$ existe sempre, e $dH^{-1}/d\lambda = -H^{-1}(dH/d\lambda)H^{-1}$,

$$\frac{d}{d\lambda}(H^{-1}G) = -H^{-1}(A + B + \lambda C)HH^{-1}G + H^{-1}(A + B + \lambda C)G = 0,$$

logo $H^{-1}G \equiv H(0)^{-1}G(0) = \mathbf{1}$, isto é, $G(\lambda) = H(\lambda)$ para todo λ . Tomando $\lambda = 1$,

$$\boxed{e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]}}$$

que é a fórmula de Baker–Campbell–Hausdorff–Glauber. Como $A + B$ comuta com $[A, B]$, ela também se escreve $e^A e^B = e^{A+B} e^{[A,B]/2}$. $\square$

d) A, B hermitianos e $[A, B] = iC \implies C$ hermitiano

O comutador de dois operadores hermitianos é *anti-hermitiano*:

$$[A, B]^\dagger = (AB - BA)^\dagger = B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger = BA - AB = -[A, B].$$

Tomando o adjunto de $[A, B] = iC$ dos dois lados,

$$-iC^\dagger = (iC)^\dagger = [A, B]^\dagger = -[A, B] = -iC \implies C^\dagger = C.$$

Portanto C é hermitiano — é por isso que o fator i é convencionalmente extraído do comutador de dois observáveis, como em $[x, p_x] = i\hbar \mathbf{1}$. $\square$

Questão 05 — Comutadores canônicos como derivadas

(Cap. V, Eqs. (V.67) e (V.68), Messiah)

Sejam $q_1, \dots, q_f$ e $p_1, \dots, p_f$ os operadores canônicos, satisfazendo as relações de comutação fundamentais

$$[q_i, q_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0, \quad [q_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij} \mathbb{1}.$$

Queremos provar que, para todo operador $A = A(q, p)$ expansível em série de potências dos q 's e p 's,

$$(V.67) \quad [p_i, A] = -i\hbar \frac{\partial A}{\partial q_i}, \quad (V.68) \quad [q_i, A] = +i\hbar \frac{\partial A}{\partial p_i}.$$

Definições. Um *monômio ordenado* é um produto

$$M = O_1 O_2 \cdots O_N, \quad O_k \in \{q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f\},$$

com os fatores numa ordem fixada (como os operadores não comutam, a ordem faz parte da definição de M). A derivada parcial de M é definida pela regra de Leibniz *preservando a ordem dos fatores*:

$$\frac{\partial M}{\partial q_i} \equiv \sum_{k=1}^N O_1 \cdots O_{k-1} \frac{\partial O_k}{\partial q_i} O_{k+1} \cdots O_N, \quad \frac{\partial q_j}{\partial q_i} = \delta_{ij}, \quad \frac{\partial p_j}{\partial q_i} = 0,$$

e analogamente para $\partial M / \partial p_i$, com $\partial p_j / \partial p_i = \delta_{ij}$ e $\partial q_j / \partial p_i = 0$. Estende-se por linearidade a $A = \sum_{\alpha} c_{\alpha} M_{\alpha}$ (série de potências, entendida termo a termo). Segue imediatamente da definição que a derivada satisfaz a regra de Leibniz não comutativa

$$\frac{\partial}{\partial q_i}(MN) = \frac{\partial M}{\partial q_i} N + M \frac{\partial N}{\partial q_i},$$

pois a soma sobre as posições dos fatores de MN se separa nas posições dentro de M e dentro de N .

O ingrediente algébrico é a **identidade de Leibniz para comutadores**, verificada por expansão direta:

$$[X, YZ] = XYZ - YZX = (XY - YX)Z + Y(XZ - ZX) = [X, Y]Z + Y[X, Z].$$

Prova de (V.67) para monômios (indução no comprimento N). Base ($N = 1$). O monômio é um único fator $O \in \{q_j, p_j\}$, e as relações fundamentais dão exatamente a tese:

$$[p_i, q_j] = -i\hbar \delta_{ij} \mathbb{1} = -i\hbar \frac{\partial q_j}{\partial q_i}, \quad [p_i, p_j] = 0 = -i\hbar \frac{\partial p_j}{\partial q_i}.$$

Passo indutivo. Suponha (V.67) válida para todos os monômios de comprimento N , e seja $M = O M'$ um monômio de comprimento $N + 1$, com O um único fator e M' de comprimento N . Pela identidade de Leibniz,

$$[p_i, O M'] = [p_i, O] M' + O [p_i, M'].$$

Aplicando a base ao primeiro termo e a hipótese de indução ao segundo,

$$[p_i, O M'] = -i\hbar \frac{\partial O}{\partial q_i} M' + O \left(-i\hbar \frac{\partial M'}{\partial q_i} \right) = -i\hbar \left(\frac{\partial O}{\partial q_i} M' + O \frac{\partial M'}{\partial q_i} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i} (O M'),$$

onde a última igualdade é a regra de Leibniz da derivada definida acima. Isso fecha a indução: (V.67) vale para todo monômio ordenado, de qualquer comprimento. Note que a ordem dos fatores é preservada em cada passagem, de modo que o resultado vale *qualquer que seja* a prescrição de ordenamento adotada para $A(q, p)$.

Prova de (V.68) para monômios. A indução é idêntica, trocando apenas a base: para um único fator,

$$[q_i, p_j] = +i\hbar \delta_{ij} \mathbf{1} = +i\hbar \frac{\partial p_j}{\partial p_i}, \quad [q_i, q_j] = 0 = +i\hbar \frac{\partial q_j}{\partial p_i},$$

e no passo indutivo,

$$[q_i, O M'] = [q_i, O] M' + O [q_i, M'] = +i\hbar \left(\frac{\partial O}{\partial p_i} M' + O \frac{\partial M'}{\partial p_i} \right) = +i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i} (O M').$$

Extensão a séries de potências. Seja $A = \sum_{\alpha} c_{\alpha} M_{\alpha}$, com M_{α} monômios ordenados e c_{α} coeficientes numéricos. Tanto o comutador $[p_i, \cdot]$ quanto a derivada $\partial/\partial q_i$ são lineares e agem termo a termo na série; aplicando o resultado para monômios a cada termo,

$$[p_i, A] = \sum_{\alpha} c_{\alpha} [p_i, M_{\alpha}] = -i\hbar \sum_{\alpha} c_{\alpha} \frac{\partial M_{\alpha}}{\partial q_i} = -i\hbar \frac{\partial A}{\partial q_i},$$

e, do mesmo modo,

$$[q_i, A] = +i\hbar \frac{\partial A}{\partial p_i}.$$

Ficam assim provadas

$[p_i, A] = -i\hbar \frac{\partial A}{\partial q_i}, \quad [q_i, A] = +i\hbar \frac{\partial A}{\partial p_i}.$

Esses são os análogos quânticos das relações clássicas $\{p_i, A\} = -\partial A/\partial q_i$ e $\{q_i, A\} = \partial A/\partial p_i$ com colchetes de Poisson, sob a correspondência $[\cdot, \cdot] \leftrightarrow i\hbar \{\cdot, \cdot\}$. □

Questão 06 — Operadores lineares e antilineares

(Merzbacher, Ex. 9.6, 9.7 e 9.10)

Usamos a notação do Merzbacher para o produto interno, (Ψ_b, Ψ_a) , com a convenção usual da física: linearidade no *segundo* argumento e antilinearidade no *primeiro*,

$$(\Psi_b, \lambda \Psi_a + \mu \Phi) = \lambda (\Psi_b, \Psi_a) + \mu (\Psi_b, \Phi), \quad (\lambda \Psi_b, \Psi_a) = \lambda^* (\Psi_b, \Psi_a),$$

para quaisquer $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$. A correspondência com a notação de Dirac é $(\Psi_b, \Psi_a) = \langle \Psi_b | \Psi_a \rangle$ e, para A linear, $(\Psi_b, A\Psi_a) = \langle \Psi_b | A | \Psi_a \rangle$. (Para operadores antilineares a notação de Dirac é ambígua — o valor de $\langle \Psi_b | A | \Psi_a \rangle$ dependeria de para que lado A age —, por isso mantemos os parênteses.)

a) O operador $P_a = \Psi_a(\Psi_a, \cdot)$ é linear

O operador é definido por $P_a\Phi = \Psi_a(\Psi_a, \Phi)$: ele devolve o vetor fixo Ψ_a multiplicado pelo escalar (Ψ_a, Φ) . Sejam Φ, Ξ vetores arbitrários e $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$. Pela linearidade do produto interno no segundo argumento,

$$P_a(\lambda\Phi + \mu\Xi) = \Psi_a(\Psi_a, \lambda\Phi + \mu\Xi) = \Psi_a[\lambda(\Psi_a, \Phi) + \mu(\Psi_a, \Xi)] = \lambda\Psi_a(\Psi_a, \Phi) + \mu\Psi_a(\Psi_a, \Xi),$$

onde no último passo usamos apenas que (Ψ_a, Φ) e (Ψ_a, Ξ) são escalares multiplicando o vetor fixo Ψ_a . Logo

$$P_a(\lambda\Phi + \mu\Xi) = \lambda P_a\Phi + \mu P_a\Xi,$$

que é exatamente a definição de operador linear. Em notação de Dirac, $P_a = |\Psi_a\rangle\langle\Psi_a|$; se $(\Psi_a, \Psi_a) = 1$, então $P_a^2\Phi = \Psi_a(\Psi_a, \Psi_a)(\Psi_a, \Phi) = P_a\Phi$, ou seja, P_a é o projetor sobre a direção de Ψ_a . $\square$

b) Elementos de matriz de um operador linear (e de um antilinear)

Seja $\{\Psi_i\}$ uma base ortonormal, $(\Psi_i, \Psi_j) = \delta_{ij}$, e expandamos

$$\Psi_a = \sum_j a_j \Psi_j, \quad a_j = (\Psi_j, \Psi_a), \quad \Psi_b = \sum_i b_i \Psi_i, \quad b_i = (\Psi_i, \Psi_b).$$

Se A é linear, então $A\Psi_a = \sum_j a_j A\Psi_j$, e usando a antilinearidade do primeiro argumento e a linearidade do segundo,

$$(\Psi_b, A\Psi_a) = \left(\sum_i b_i \Psi_i, \sum_j a_j A\Psi_j \right) = \sum_{ij} b_i^* a_j (\Psi_i, A\Psi_j) = \sum_{ij} b_i^* A_{ij} a_j,$$

com $A_{ij} \equiv (\Psi_i, A\Psi_j) = \langle \Psi_i | A | \Psi_j \rangle$.

Em forma matricial, com a e b os vetores-coluna de componentes a_j e b_i , e $A = (A_{ij})$ a matriz de A na base,

$$(\Psi_b, A\Psi_a) = b^\dagger A a, \quad b^\dagger = (b_1^* \ b_2^* \ \dots).$$

Se A é antilinear, então $A(\lambda\Phi + \mu\Xi) = \lambda^* A\Phi + \mu^* A\Xi$, de modo que $A\Psi_a = \sum_j a_j^* A\Psi_j$: os coeficientes saem conjugados. Repetindo o cálculo,

$$(\Psi_b, A\Psi_a) = \sum_{ij} b_i^* A_{ij} a_j^* \quad \Longleftrightarrow \quad (\Psi_b, A\Psi_a) = b^\dagger A a^*,$$

com a mesma definição $A_{ij} = (\Psi_i, A\Psi_j)$ e a^* o vetor-coluna das componentes conjugadas. A única diferença é a conjugação das componentes do vetor sobre o qual o operador antilinear age. $\square$

c) O “transposto” A^T : impossível para A linear, antilinear para A antilinear

Procuramos um operador A^T tal que

$$(\Psi_b, A\Psi_a) = (\Psi_a, A^T\Psi_b) \quad \text{para todos } \Psi_a, \Psi_b. \quad (*)$$

Caso A linear. Suponha que exista um operador A^T (de qualquer natureza, linear ou não) satisfazendo (*), e substitua $\Psi_a \rightarrow \lambda\Psi_a$ com $\lambda \in \mathbb{C}$ arbitrário. Do lado esquerdo, como A é linear e o produto interno é linear no segundo argumento,

$$(\Psi_b, A(\lambda\Psi_a)) = (\Psi_b, \lambda A\Psi_a) = \lambda(\Psi_b, A\Psi_a).$$

Do lado direito, a antilinearidade do *primeiro* argumento do produto interno dá, independentemente de qualquer propriedade de A^T ,

$$(\lambda\Psi_a, A^T\Psi_b) = \lambda^*(\Psi_a, A^T\Psi_b) = \lambda^*(\Psi_b, A\Psi_a),$$

onde na última igualdade usamos (*) com o par original (Ψ_a, Ψ_b) . Igualando os dois lados,

$$(\lambda - \lambda^*)(\Psi_b, A\Psi_a) = 0 \quad \text{para todo } \lambda \in \mathbb{C}.$$

Tomando $\lambda = i$, obtemos $(\Psi_b, A\Psi_a) = 0$ para *todos* Ψ_a, Ψ_b ; em particular, com $\Psi_b = A\Psi_a$, segue $\|A\Psi_a\|^2 = 0$ para todo Ψ_a , isto é, $A = 0$. Portanto, para qualquer operador linear $A \neq 0$ a equação (*) é *inconsistente*: nenhum operador A^T pode satisfazê-la. A relação correta para A linear envolve o adjunto,

$$(\Psi_b, A\Psi_a) = (A^\dagger\Psi_b, \Psi_a) = (\Psi_a, A^\dagger\Psi_b)^*,$$

e é precisamente a conjugação complexa do lado direito que a equação (*) omite — daí a obstrução.

Caso A antilinear. Agora a substituição $\Psi_a \rightarrow \lambda\Psi_a$ produz λ^* dos dois lados de (*) — à esquerda porque $A(\lambda\Psi_a) = \lambda^*A\Psi_a$, à direita pela antilinearidade do primeiro argumento —, de modo que a equação é consistente. Construímos A^T explicitamente: fixada uma base ortonormal $\{\Psi_j\}$, defina

$$A^T\Psi_b \equiv \sum_j (\Psi_b, A\Psi_j) \Psi_j.$$

Verificação de (*): escrevendo $\Psi_a = \sum_j a_j \Psi_j$,

$$(\Psi_a, A^T\Psi_b) = \sum_j (\Psi_b, A\Psi_j) (\Psi_a, \Psi_j) = \sum_j a_j^* (\Psi_b, A\Psi_j) = \left(\Psi_b, A \sum_j a_j \Psi_j \right) = (\Psi_b, A\Psi_a),$$

onde na penúltima igualdade usamos a antilinearidade de A (que conjugua os coeficientes a_j ao atravessá-lo, $A \sum_j a_j \Psi_j = \sum_j a_j^* A\Psi_j$) e a linearidade do segundo argumento do produto interno. O operador é único: se χ também satisfaz $(\Psi_a, \chi) = (\Psi_b, A\Psi_a)$ para todo Ψ_a , então $(\Psi_a, A^T\Psi_b - \chi) = 0$ para todo Ψ_a , logo $\chi = A^T\Psi_b$.

Finalmente, A^T é *antilinear*: para $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$,

$$\begin{aligned} A^T(\lambda\Psi_b + \mu\Psi_c) &= \sum_j (\lambda\Psi_b + \mu\Psi_c, A\Psi_j) \Psi_j \\ &= \lambda^* \sum_j (\Psi_b, A\Psi_j) \Psi_j + \mu^* \sum_j (\Psi_c, A\Psi_j) \Psi_j = \lambda^* A^T\Psi_b + \mu^* A^T\Psi_c, \end{aligned}$$

pela antilinearidade do primeiro argumento do produto interno. Assim, a equação (*) define um único operador A^T , e ele é antilinear, sempre que A o for. $\square$

Questão 07 — Traços e somas sobre bases ortonormais

(Merzbacher, Ex. 9.15, 9.18 e 9.19; Messiah, P. 7.6)

Em toda a questão, $\{|K_i\rangle\}$, $\{|u_i\rangle\}$ e $\{|v_j\rangle\}$ denotam bases ortonormais completas do espaço de Hilbert, de modo que valem a ortonormalidade e a relação de completeza (resolução da identidade)

$$\langle K_i | K_j \rangle = \delta_{ij}, \quad \sum_i |K_i\rangle\langle K_i| = \mathbb{1},$$

e o mesmo para as demais bases. Nas manipulações com somas duplas, os termos são todos não negativos (itens a e c) ou as somas são supostas absolutamente convergentes (dimensão finita, ou operadores de classe traço, item b), o que legitima trocar a ordem de soma.

a) A soma $\sum_i |\langle a | A | K_i \rangle|^2$

Cada termo é o módulo quadrado de um número complexo, $|z|^2 = z z^*$, e $\langle a | A | K_i \rangle^* = \langle K_i | A^\dagger | a \rangle$. Logo,

$$\sum_i |\langle a | A | K_i \rangle|^2 = \sum_i \langle a | A | K_i \rangle \langle K_i | A^\dagger | a \rangle = \langle a | A \left(\sum_i |K_i\rangle\langle K_i| \right) A^\dagger | a \rangle = \langle a | A A^\dagger | a \rangle,$$

onde usamos a completeza da base. O resultado é a norma quadrada do vetor $A^\dagger |a\rangle$:

$$\sum_i |\langle a | A | K_i \rangle|^2 = \langle a | A A^\dagger | a \rangle = \|A^\dagger |a\rangle\|^2 \geq 0.$$

Se A é unitário, $AA^\dagger = \mathbb{1}$, e como $|a\rangle$ é normalizado,

$$\sum_i |\langle a | A | K_i \rangle|^2 = \langle a | a \rangle = 1.$$

A soma é independente de A unitário e da base: é a afirmação de que a linha “ a ” da matriz unitária $\langle a | A | K_i \rangle$ tem norma 1. $\square$

b) $\text{Tr } A$ independe da base e $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$

Independência da base. Sejam $\{|u_i\rangle\}$ e $\{|v_k\rangle\}$ duas bases ortonormais. Inserindo a completeza de $\{|v_k\rangle\}$ e trocando a ordem das somas,

$$\sum_i \langle u_i | A | u_i \rangle = \sum_i \sum_k \langle u_i | A | v_k \rangle \langle v_k | u_i \rangle = \sum_k \langle v_k | \left(\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| \right) A | v_k \rangle = \sum_k \langle v_k | A | v_k \rangle,$$

onde no passo intermediário usamos que $\langle v_k | u_i \rangle \langle u_i | A | v_k \rangle = \langle v_k | (|u_i\rangle\langle u_i|) A | v_k \rangle$ e, em seguida, a completeza de $\{|u_i\rangle\}$. Portanto $\text{Tr } A = \sum_i \langle u_i | A | u_i \rangle$ tem o mesmo valor em qualquer base ortonormal.

Propriedade cíclica. Inserindo a completeza entre A e B e trocando a ordem das somas (os fatores $\langle u_i | A | u_j \rangle$ e $\langle u_j | B | u_i \rangle$ são números, logo comutam),

$$\begin{aligned} \text{Tr}(AB) &= \sum_i \langle u_i | AB | u_i \rangle = \sum_{i,j} \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | B | u_i \rangle \\ &= \sum_j \langle u_j | B \left(\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| \right) A | u_j \rangle = \sum_j \langle u_j | BA | u_j \rangle = \text{Tr}(BA). \quad \square \end{aligned}$$

c) $\sum_{i,j} |\langle u_i | A | v_j \rangle|^2 = \text{Tr}(AA^\dagger) = \text{Tr}(A^\dagger A)$

Como no item (a), $|\langle u_i | A | v_j \rangle|^2 = \langle u_i | A | v_j \rangle \langle v_j | A^\dagger | u_i \rangle$, com todos os termos não negativos — a ordem da soma dupla é, portanto, irrelevante. Somando primeiro em j (completeza de $\{|v_j\rangle\}$),

$$\sum_{i,j} |\langle u_i | A | v_j \rangle|^2 = \sum_i \langle u_i | A \left(\sum_j |v_j\rangle\langle v_j| \right) A^\dagger | u_i \rangle = \sum_i \langle u_i | AA^\dagger | u_i \rangle = \text{Tr}(AA^\dagger);$$

somando primeiro em i (completeza de $\{|u_i\rangle\}$),

$$\sum_{i,j} |\langle u_i | A | v_j \rangle|^2 = \sum_j \langle v_j | A^\dagger \left(\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| \right) A | v_j \rangle = \sum_j \langle v_j | A^\dagger A | v_j \rangle = \text{Tr}(A^\dagger A).$$

As duas expressões são iguais entre si (o que também segue de $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$ do item b, com $B = A^\dagger$).

Independência das bases: $\text{Tr}(AA^\dagger)$ não faz referência alguma à base $\{|v_j\rangle\}$ e, pelo item (b), seu valor não depende da base $\{|u_i\rangle\}$ em que é calculado; simetricamente, $\text{Tr}(A^\dagger A)$ não menciona $\{|u_i\rangle\}$ e independe de $\{|v_j\rangle\}$. Logo a soma $\sum_{i,j} |\langle u_i | A | v_j \rangle|^2$ tem o mesmo valor para qualquer par de bases ortonormais — ela define a norma (de Hilbert–Schmidt) do operador A , $\|A\|^2 = \text{Tr}(A^\dagger A)$. $\square$

d) $\text{Tr}(|u\rangle\langle u|) = \langle u | u \rangle$ e $\text{Tr}(|u\rangle\langle v|) = \langle v | u \rangle$

Calculemos diretamente o caso geral $|u\rangle\langle v|$ numa base ortonormal $\{|K_i\rangle\}$. Cada termo da soma é o produto de dois números complexos, que comutam:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(|u\rangle\langle v|) &= \sum_i \langle K_i | (|u\rangle\langle v|) | K_i \rangle = \sum_i \langle K_i | u \rangle \langle v | K_i \rangle \\ &= \sum_i \langle v | K_i \rangle \langle K_i | u \rangle = \langle v | \left(\sum_i |K_i\rangle\langle K_i| \right) | u \rangle = \langle v | u \rangle. \end{aligned}$$

A soma converge absolutamente porque, pela desigualdade de Cauchy–Schwarz em ℓ^2 ,

$$\sum_i |\langle K_i | u \rangle \langle v | K_i \rangle| \leq \left(\sum_i |\langle K_i | u \rangle|^2 \right)^{1/2} \left(\sum_i |\langle K_i | v \rangle|^2 \right)^{1/2} = \| |u\rangle \| \| |v\rangle \| < \infty,$$

já que $|u\rangle$ e $|v\rangle$ têm norma finita — o que garante que $|u\rangle\langle v|$ é de classe traço e que o resultado independe da base, pelo item (b). O caso particular $|v\rangle = |u\rangle$ dá imediatamente

$$\text{Tr}(|u\rangle\langle u|) = \langle u | u \rangle.$$

Em particular, para $|u\rangle$ normalizado o projetor $|u\rangle\langle u|$ tem traço 1. $\square$

Questão 08 — $\det(e^A) = \exp(\text{Tr } A)$

(Merzbacher, Exercício 10.4.)

Seja A uma matriz $n \times n$ (real ou complexa). A exponencial de matriz é definida pela série

$$e^{tA} \equiv \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} A^k, \quad t \in \mathbb{R},$$

absolutamente convergente para todo t (pois $\|A^k\| \leq \|A\|^k$ em qualquer norma submultiplicativa). Provaremos a identidade $\det(e^A) = e^{\text{Tr } A}$ diretamente dessa expansão, sem recorrer a autovalores, em três passos.

Passo 1: $\det(\mathbb{1} + \epsilon B) = 1 + \epsilon \text{Tr } B + O(\epsilon^2)$

Lema. Para qualquer matriz B , $n \times n$,

$$\det(\mathbb{1} + \epsilon B) = 1 + \epsilon \text{Tr } B + O(\epsilon^2),$$

e o termo $O(\epsilon^2)$ tem coeficientes polinomiais nos elementos de B (logo permanece uniformemente $O(\epsilon^2)$ se $B = B(\epsilon)$ tiver elementos limitados quando $\epsilon \rightarrow 0$).

Demonstração. Pela definição do determinante (fórmula de Leibniz),

$$\det M = \sum_{\sigma \in S_n} \text{sgn}(\sigma) \prod_{i=1}^n M_{i\sigma(i)},$$

onde S_n é o grupo das permutações de $\{1, \dots, n\}$. Para $M = \mathbb{1} + \epsilon B$ temos $M_{ij} = \delta_{ij} + \epsilon B_{ij}$. Separamos a soma em duas partes:

(i) *Permutação identidade* ($\sigma = \text{id}$, $\text{sgn} = +1$):

$$\prod_{i=1}^n (1 + \epsilon B_{ii}) = 1 + \epsilon \sum_{i=1}^n B_{ii} + O(\epsilon^2) = 1 + \epsilon \text{Tr } B + O(\epsilon^2).$$

(ii) *Permutações $\sigma \neq \text{id}$* : toda permutação diferente da identidade desloca *pelo menos dois* índices, isto é, existem ao menos dois valores de i com $\sigma(i) \neq i$. Para cada um deles o fator correspondente é puramente fora da diagonal, $M_{i\sigma(i)} = \epsilon B_{i\sigma(i)} = O(\epsilon)$. O produto $\prod_i M_{i\sigma(i)}$ contém portanto ao menos dois fatores de ordem ϵ , sendo $O(\epsilon^2)$.

Somando as duas contribuições obtém-se o lema; todos os coeficientes das potências de ϵ são polinômios nos B_{ij} , o que dá a uniformidade afirmada. $\square$

Passo 2: $F(t) \equiv \det(e^{tA})$ satisfaz $F'(t) = (\text{Tr } A) F(t)$

Primeiro, a propriedade de grupo $e^{(t+\epsilon)A} = e^{tA} e^{\epsilon A}$ segue da própria série: como tA e ϵA comutam, o produto de Cauchy das duas séries absolutamente convergentes e o teorema binomial dão

$$e^{tA} e^{\epsilon A} = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^m \frac{t^k \epsilon^{m-k}}{k! (m-k)!} A^m = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(t+\epsilon)^m}{m!} A^m = e^{(t+\epsilon)A}.$$

Como o determinante de um produto é o produto dos determinantes,

$$F(t+\epsilon) = \det(e^{tA} e^{\epsilon A}) = F(t) \det(e^{\epsilon A}).$$

Agora expandimos $e^{\epsilon A}$ em ϵ :

$$e^{\epsilon A} = \mathbb{1} + \epsilon C(\epsilon), \quad C(\epsilon) \equiv A + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{\epsilon^{k-1}}{k!} A^k = A + O(\epsilon),$$

com $C(\epsilon)$ limitada quando $\epsilon \rightarrow 0$. Pelo Lema do Passo 1 (na forma uniforme),

$$\det(e^{\epsilon A}) = 1 + \epsilon \operatorname{Tr} C(\epsilon) + O(\epsilon^2) = 1 + \epsilon \operatorname{Tr} A + O(\epsilon^2),$$

pois $\operatorname{Tr} C(\epsilon) = \operatorname{Tr} A + O(\epsilon)$. Logo

$$\frac{F(t + \epsilon) - F(t)}{\epsilon} = F(t) \frac{\det(e^{\epsilon A}) - 1}{\epsilon} = F(t) [\operatorname{Tr} A + O(\epsilon)] \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} (\operatorname{Tr} A) F(t),$$

ou seja, F é diferenciável em todo t e

$$F'(t) = (\operatorname{Tr} A) F(t), \quad F(0) = \det \mathbb{1} = 1.$$

Passo 3: integração da equação diferencial

Defina $G(t) \equiv e^{-t \operatorname{Tr} A} F(t)$. Então

$$G'(t) = e^{-t \operatorname{Tr} A} [F'(t) - (\operatorname{Tr} A) F(t)] = 0 \quad \text{para todo } t,$$

de modo que G é constante: $G(t) = G(0) = F(0) = 1$. Portanto

$$F(t) = \det(e^{tA}) = e^{t \operatorname{Tr} A} \quad \text{para todo } t \in \mathbb{R}.$$

Em particular, tomando $t = 1$,

$\det(e^A) = e^{\operatorname{Tr} A}.$

Note que em nenhum momento usamos autovalores ou a forma de Jordan de A : apenas a série de e^{tA} , a definição de determinante e a multiplicatividade $\det(MN) = \det M \det N$. $\square$

Questão 09 — Base ortonormal, projetores e funções de operador em duas dimensões

(Desai, Problema 1.1.)

Definimos os vetores de estado como matrizes-coluna

$$|\alpha_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\alpha_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

cujos conjugados hermitianos (transposta + conjugação complexa) são as matrizes-linha

$$\langle\alpha_1| = (1 \ 0), \quad \langle\alpha_2| = (0 \ 1).$$

O produto interno $\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle$ é o produto matricial linha $\times$ coluna (um número), e o produto externo $|\alpha_i\rangle\langle\alpha_j|$ é o produto coluna $\times$ linha (uma matriz 2×2).

a) Ortonormalidade

Calculando os quatro produtos internos:

$$\begin{aligned} \langle\alpha_1|\alpha_1\rangle &= (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1, & \langle\alpha_2|\alpha_2\rangle &= (0 \ 1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 1, \\ \langle\alpha_1|\alpha_2\rangle &= (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0, & \langle\alpha_2|\alpha_1\rangle &= (0 \ 1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0. \end{aligned}$$

Logo $\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \delta_{ij}$: os vetores são normalizados e mutuamente ortogonais. □

b) Qualquer coluna é combinação linear dos $|\alpha_i\rangle$

Para a, b arbitrários (reais ou complexos),

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ b \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = a |\alpha_1\rangle + b |\alpha_2\rangle.$$

Os coeficientes são únicos e dados pelas projeções: escrevendo $|\psi\rangle = a |\alpha_1\rangle + b |\alpha_2\rangle$ e usando (a),

$$\langle\alpha_1|\psi\rangle = a, \quad \langle\alpha_2|\psi\rangle = b.$$

Portanto $\{|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle\}$ gera todo o espaço das matrizes-coluna 2×1 e é uma base. □

c) Os produtos externos $|\alpha_i\rangle\langle\alpha_j|$ como operadores

O produto coluna $\times$ linha produz matrizes 2×2 :

$$\begin{aligned} |\alpha_1\rangle\langle\alpha_1| &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \ 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, & |\alpha_1\rangle\langle\alpha_2| &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0 \ 1) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ |\alpha_2\rangle\langle\alpha_1| &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (1 \ 0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & |\alpha_2\rangle\langle\alpha_2| &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0 \ 1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Sendo matrizes 2×2 , cada $|\alpha_i\rangle\langle\alpha_j|$ age linearmente sobre as matrizes-coluna, isto é, é um operador linear no espaço de estados. Sua ação tem a forma característica

$$(|\alpha_i\rangle\langle\alpha_j|) |\psi\rangle = |\alpha_i\rangle \langle\alpha_j|\psi\rangle,$$

ou seja, projeta na direção $|\alpha_j\rangle$ e devolve o resultado na direção $|\alpha_i\rangle$. □

d) Relação de completeza

Somando os dois produtos externos diagonais de (c):

$$\sum_{i=1}^2 |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbb{1}_{2 \times 2}. \quad \square$$

e) A como combinação linear dos $|\alpha_i\rangle\langle\alpha_j|$

Usando as quatro matrizes de (c),

$$a |\alpha_1\rangle\langle\alpha_1| + b |\alpha_1\rangle\langle\alpha_2| + c |\alpha_2\rangle\langle\alpha_1| + d |\alpha_2\rangle\langle\alpha_2| = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = A.$$

Isso é um caso particular da identidade geral obtida inserindo duas vezes a completeza de (d):

$$A = \mathbb{1} A \mathbb{1} = \sum_{i,j=1}^2 |\alpha_i\rangle \langle\alpha_i| A |\alpha_j\rangle \langle\alpha_j| = \sum_{i,j=1}^2 \langle\alpha_i| A |\alpha_j\rangle |\alpha_i\rangle\langle\alpha_j|,$$

com elementos de matriz $\langle\alpha_1|A|\alpha_1\rangle = a$, $\langle\alpha_1|A|\alpha_2\rangle = b$, $\langle\alpha_2|A|\alpha_1\rangle = c$ e $\langle\alpha_2|A|\alpha_2\rangle = d$. Os $|\alpha_i\rangle\langle\alpha_j|$ formam, portanto, uma base do espaço dos operadores 2×2 . $\square$

f) A com $A|\alpha_1\rangle = +|\alpha_1\rangle$ e $A|\alpha_2\rangle = -|\alpha_2\rangle$

Impondo as duas condições de autovalor sobre $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$:

$$A|\alpha_1\rangle = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \implies a = 1, c = 0,$$

$$A|\alpha_2\rangle = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ d \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \implies b = 0, d = -1.$$

Portanto os elementos de matriz são $a = 1$, $b = c = 0$, $d = -1$, ou seja,

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = |\alpha_1\rangle\langle\alpha_1| - |\alpha_2\rangle\langle\alpha_2|,$$

que é exatamente a matriz de Pauli σ_3 . $\square$

g) $B^{1/2}$ e $\ln B$ para $B = \begin{pmatrix} 4 & 3 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$

Diagonalização. O polinômio característico é

$$\det(B - \lambda \mathbb{1}) = (4 - \lambda)^2 - 9 = 0 \implies 4 - \lambda = \pm 3 \implies b_1 = 7, \quad b_2 = 1.$$

Os autovetores normalizados correspondentes são

$$|b_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (b_1 = 7), \quad |b_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (b_2 = 1),$$

como se verifica diretamente: $B \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 7 \end{pmatrix}$ e $B \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$. Sendo B hermitiana, $\langle b_1 | b_2 \rangle = 0$ e os projetores espectrais

$$P_1 \equiv |b_1\rangle\langle b_1| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad P_2 \equiv |b_2\rangle\langle b_2| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

satisfazem $P_m P_n = \delta_{mn} P_n$ e $P_1 + P_2 = \mathbb{1}$. A decomposição espectral fica

$$B = 7 P_1 + 1 \cdot P_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 7+1 & 7-1 \\ 7-1 & 7+1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 3 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}. \checkmark$$

Função de operador. Para uma função f definida nos autovalores, o cálculo funcional dá

$$f(B) = \sum_n f(b_n) |b_n\rangle\langle b_n| = f(7) P_1 + f(1) P_2,$$

definição consistente graças a $P_m P_n = \delta_{mn} P_n$: potências (e séries) de $f(B)$ agem autovalor a autovalor.

Raiz quadrada. Como $b_1, b_2 > 0$, tomamos a raiz positiva:

$$B^{1/2} = \sqrt{7} P_1 + \sqrt{1} P_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{7}+1 & \sqrt{7}-1 \\ \sqrt{7}-1 & \sqrt{7}+1 \end{pmatrix}.$$

Verificação: usando a ortogonalidade dos projetores,

$$(B^{1/2})^2 = 7 P_1^2 + \sqrt{7} (P_1 P_2 + P_2 P_1) + P_2^2 = 7 P_1 + P_2 = B. \checkmark$$

Logaritmo. Com $\ln 7$ e $\ln 1 = 0$,

$$\ln B = (\ln 7) P_1 + (\ln 1) P_2 = \frac{\ln 7}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\ln 7}{2} & \frac{\ln 7}{2} \\ \frac{\ln 7}{2} & \frac{\ln 7}{2} \end{pmatrix}.$$

Verificação: $\ln B$ tem os mesmos autovetores $|b_n\rangle$, com autovalores $\ln b_n$; logo

$$e^{\ln B} = \sum_n e^{\ln b_n} |b_n\rangle\langle b_n| = 7 P_1 + 1 \cdot P_2 = B. \quad \square$$

Questão 10 — Transformada de Cayley e forma exponencial de um operador unitário

(Desai, Problema 1.3)

Ao longo da questão, U é unitário, $U^\dagger U = UU^\dagger = \mathbb{1}$, e o espaço de kets tem dimensão finita.

a) $U = (\mathbb{1} + iK)(\mathbb{1} - iK)^{-1}$, com K hermitiano

Invertibilidade de $\mathbb{1} - iK$. Seja $K = K^\dagger$. O adjunto de $(\mathbb{1} - iK)|\psi\rangle$ é $\langle\psi|(\mathbb{1} + iK)$, e $(\mathbb{1} + iK)(\mathbb{1} - iK) = \mathbb{1} + K^2$; logo, para todo ket $|\psi\rangle$,

$$\|(\mathbb{1} - iK)|\psi\rangle\|^2 = \langle\psi|(\mathbb{1} + iK)(\mathbb{1} - iK)|\psi\rangle = \langle\psi|\mathbb{1} + K^2|\psi\rangle = \|\psi\|^2 + \|K|\psi\rangle\|^2 \geq \|\psi\|^2.$$

Assim $(\mathbb{1} - iK)|\psi\rangle = 0$ força $|\psi\rangle = 0$: o núcleo é trivial e, em dimensão finita, $\mathbb{1} - iK$ é invertível. (Equivalentemente: K hermitiano tem espectro real, e os autovalores $1 - i\kappa$, $\kappa \in \mathbb{R}$, de $\mathbb{1} - iK$ nunca se anulam.) O mesmo argumento vale para $\mathbb{1} + iK$.

Os fatores comutam. $\mathbb{1} + iK$ e $\mathbb{1} - iK$ são polinômios em K , portanto

$$(\mathbb{1} + iK)(\mathbb{1} - iK) = (\mathbb{1} - iK)(\mathbb{1} + iK) = \mathbb{1} + K^2.$$

Multiplicando essa igualdade por $(\mathbb{1} - iK)^{-1}$ à esquerda e à direita obtém-se

$$(\mathbb{1} - iK)^{-1}(\mathbb{1} + iK) = (\mathbb{1} + iK)(\mathbb{1} - iK)^{-1},$$

de modo que a notação de “fração” $U = \frac{\mathbb{1} + iK}{\mathbb{1} - iK}$ não é ambígua.

Unitariedade. Como $[(\mathbb{1} - iK)^{-1}]^\dagger = [(\mathbb{1} - iK)^\dagger]^{-1} = (\mathbb{1} + iK)^{-1}$, temos $U^\dagger = (\mathbb{1} + iK)^{-1}(\mathbb{1} - iK)$ e, usando a comutatividade dos fatores,

$$U^\dagger U = (\mathbb{1} + iK)^{-1}(\mathbb{1} - iK)(\mathbb{1} + iK)(\mathbb{1} - iK)^{-1} = (\mathbb{1} + iK)^{-1}(\mathbb{1} + iK)(\mathbb{1} - iK)(\mathbb{1} - iK)^{-1} = \mathbb{1},$$

e, de modo idêntico, $UU^\dagger = \mathbb{1}$.

Recíproca: todo unitário sem o autovalor -1 é desta forma. Se $U|u\rangle = \lambda|u\rangle$ com $|u\rangle \neq 0$, então $\|u\|^2 = \langle u|U^\dagger U|u\rangle = |\lambda|^2\|u\|^2$, logo $|\lambda| = 1$. Suponha que -1 não seja autovalor de U ; então $\mathbb{1} + U$ é invertível e podemos definir

$$K \equiv i(\mathbb{1} - U)(\mathbb{1} + U)^{-1} = i(\mathbb{1} + U)^{-1}(\mathbb{1} - U),$$

onde os fatores comutam pelo mesmo argumento anterior (ambos são funções de U). Esse K é hermitiano: usando $U^\dagger = U^{-1}$,

$$\mathbb{1} - U^\dagger = -U^{-1}(\mathbb{1} - U), \quad (\mathbb{1} + U^\dagger)^{-1} = [U^{-1}(\mathbb{1} + U)]^{-1} = (\mathbb{1} + U)^{-1}U,$$

logo

$$K^\dagger = -i(\mathbb{1} + U^\dagger)^{-1}(\mathbb{1} - U^\dagger) = -i(\mathbb{1} + U)^{-1}U[-U^{-1}(\mathbb{1} - U)] = i(\mathbb{1} + U)^{-1}(\mathbb{1} - U) = K.$$

Finalmente,

$$\mathbb{1} + iK = \mathbb{1} - (\mathbb{1} - U)(\mathbb{1} + U)^{-1} = [(\mathbb{1} + U) - (\mathbb{1} - U)](\mathbb{1} + U)^{-1} = 2U(\mathbb{1} + U)^{-1},$$

$$\mathbb{1} - iK = \mathbb{1} + (\mathbb{1} - U)(\mathbb{1} + U)^{-1} = [(\mathbb{1} + U) + (\mathbb{1} - U)](\mathbb{1} + U)^{-1} = 2(\mathbb{1} + U)^{-1},$$

donde

$$(\mathbb{1} + iK)(\mathbb{1} - iK)^{-1} = 2U(\mathbb{1} + U)^{-1} \cdot \frac{1}{2}(\mathbb{1} + U) = U.$$

Espectralmente, se $U|n\rangle = e^{i\theta_n}|n\rangle$ com $\theta_n \in (-\pi, \pi)$, então $K|n\rangle = \tan(\theta_n/2)|n\rangle$, pois $\frac{1 + i \tan(\theta/2)}{1 - i \tan(\theta/2)} = e^{i\theta}$; a exclusão do autovalor -1 (isto é, $\theta = \pi$) é exatamente a condição para que $\tan(\theta/2)$ seja finito. $\square$

b) $U = e^{iC}$, com C hermitiano

U é normal, pois $[U, U^\dagger] = UU^\dagger - U^\dagger U = \mathbb{1} - \mathbb{1} = 0$. Pelo teorema espectral existe, então, uma base ortonormal $\{|n\rangle\}$ de autokets, $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$, com

$$U = \sum_n \lambda_n |n\rangle\langle n|,$$

e já mostramos que $|\lambda_n| = 1$; escrevemos $\lambda_n = e^{i\theta_n}$ com $\theta_n \in (-\pi, \pi]$ real. Defina

$$C \equiv \sum_n \theta_n |n\rangle\langle n|.$$

Como os θ_n são reais e $(|n\rangle\langle n|)^\dagger = |n\rangle\langle n|$, vale $C^\dagger = C$. Da ortonormalidade segue $|n\rangle\langle n| |m\rangle\langle m| = \delta_{nm} |n\rangle\langle n|$ e, portanto, $C^p = \sum_n \theta_n^p |n\rangle\langle n|$ para todo $p \geq 1$. Usando a série de potências e, no termo $p = 0$, a relação de completeza $\mathbb{1} = \sum_n |n\rangle\langle n|$,

$$e^{iC} = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(iC)^p}{p!} = \sum_n \left[\sum_{p=0}^{\infty} \frac{(i\theta_n)^p}{p!} \right] |n\rangle\langle n| = \sum_n e^{i\theta_n} |n\rangle\langle n| = U.$$

Ao contrário da transformada de Cayley, esta representação não exige excluir o autovalor -1 (basta tomar $\theta_n = \pi$). $\square$

c) $U = A + iB$: A e B comutam; expressão em termos de C

Decomposição hermitiana. Defina

$$A \equiv \frac{U + U^\dagger}{2}, \quad B \equiv \frac{U - U^\dagger}{2i}.$$

Claramente $A^\dagger = A$, $B^\dagger = B$ e $A + iB = U$. A decomposição é única: se $U = A + iB$ com A, B hermitianos, então $U^\dagger = A - iB$ e, somando e subtraindo, recuperam-se as fórmulas acima.

Comutação. Pela bilinearidade do comutador,

$$[A, B] = \frac{1}{4i} [U + U^\dagger, U - U^\dagger] = \frac{1}{4i} (-[U, U^\dagger] + [U^\dagger, U]) = -\frac{1}{2i} [U, U^\dagger] = 0,$$

pois $UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{1}$. Logo A e B comutam para todo U unitário (na verdade, para todo U normal).

Em termos de C . Como $C^\dagger = C$, o adjunto termo a termo da série dá $U^\dagger = (e^{iC})^\dagger = e^{-iC}$, e então

$$A = \frac{e^{iC} + e^{-iC}}{2} = \cos C = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(-1)^p C^{2p}}{(2p)!}, \quad B = \frac{e^{iC} - e^{-iC}}{2i} = \sin C = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(-1)^p C^{2p+1}}{(2p+1)!}.$$

Ambas as séries têm coeficientes reais em potências do operador hermitiano C , logo A e B são hermitianos e, sendo funções do mesmo operador C , comutam entre si — em pleno acordo com o resultado anterior. Como verificação adicional, a unitariedade dá

$$\mathbb{1} = U^\dagger U = (A - iB)(A + iB) = A^2 + B^2 + i[A, B] = A^2 + B^2,$$

isto é, $\cos^2 C + \sin^2 C = \mathbb{1}$. $\square$

Questão 11 — Autokets simultâneos de dois observáveis que comutam

(Sakurai, Problema 1.23)

Na base ortonormal $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$, os operadores são representados por

$$A \doteq \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix}, \quad B \doteq \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix},$$

com a e b reais e não nulos. Ambos são hermitianos: A é diagonal real e a submatriz 2×2 de B é $b\sigma_y$, com σ_y a matriz de Pauli, que é hermitiana.

a) O espectro de B é degenerado?

O polinômio característico de B é

$$\det(B - \lambda \mathbb{1}) = (b - \lambda) \det \begin{pmatrix} -\lambda & -ib \\ ib & -\lambda \end{pmatrix} = (b - \lambda)(\lambda^2 - b^2) = -(\lambda - b)^2(\lambda + b).$$

Os autovalores são, portanto, $\lambda = b$ (multiplicidade 2) e $\lambda = -b$ (multiplicidade 1). Sim: para $b \neq 0$, o espectro de B é degenerado — o autovalor b é duplamente degenerado, com autoespaço bidimensional. (Se fosse $b = 0$, a degenerescência seria total e trivial, $B = 0$.) $\square$

b) A e B comutam

Multiplicando as matrizes nas duas ordens,

$$AB = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ab & 0 & 0 \\ 0 & 0 & iab \\ 0 & -iab & 0 \end{pmatrix},$$

$$BA = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ab & 0 & 0 \\ 0 & 0 & iab \\ 0 & -iab & 0 \end{pmatrix},$$

logo $[A, B] = AB - BA = 0$. A razão estrutural: na decomposição $\{|1\rangle\} \oplus \text{span}\{|2\rangle, |3\rangle\}$ ambos os operadores são bloco-diagonais e, no bloco bidimensional (o autoespaço degenerado de A com autovalor $-a$), A reduz-se ao múltiplo $-a \mathbb{1}$ da identidade, que comuta com qualquer operador ali definido. $\square$

c) Base ortonormal de autokets simultâneos

Como A e B são hermitianos e $[A, B] = 0$, existe uma base ortonormal de autokets simultâneos. Vamos construí-la.

O ket $|1\rangle$. Diretamente das matrizes, $A|1\rangle = a|1\rangle$ e $B|1\rangle = b|1\rangle$: $|1\rangle$ já é autoket simultâneo.

O subespaço $\text{span}\{|2\rangle, |3\rangle\}$. Nesse subespaço A age como $-a \mathbb{1}$; logo *qualquer* autoket de B ali é automaticamente autoket de A com autovalor $-a$, e basta diagonalizar B . Para $|\psi\rangle = c_2|2\rangle + c_3|3\rangle$, a equação $B|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ lê-se

$$\begin{pmatrix} 0 & -ib \\ ib & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} \iff -ib c_3 = \lambda c_2, \quad ib c_2 = \lambda c_3.$$

Para $\lambda = +b$ obtém-se $c_3 = i c_2$; para $\lambda = -b$, $c_3 = -i c_2$. Normalizando e fixando a fase $c_2 = 1/\sqrt{2}$, definimos

$$|u_{\pm}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle \pm i |3\rangle).$$

Verificação explícita. Das colunas de B lê-se $B|2\rangle = ib|3\rangle$ e $B|3\rangle = -ib|2\rangle$, logo

$$B|u_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(ib|3\rangle \pm i(-ib)|2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\pm b|2\rangle + ib|3\rangle) = \pm b \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle \pm i |3\rangle) = \pm b |u_{\pm}\rangle,$$

e, como $A|2\rangle = -a|2\rangle$ e $A|3\rangle = -a|3\rangle$,

$$A|u_{\pm}\rangle = -a |u_{\pm}\rangle.$$

Os três kets são ortonormais: $\langle 1|u_{\pm}\rangle = 0$ trivialmente,

$$\begin{aligned}\langle u_{\pm}|u_{\pm}\rangle &= \frac{1}{2}(\langle 2| \mp i \langle 3|)(|2\rangle \pm i |3\rangle) = \frac{1}{2}(1 + 1) = 1, \\ \langle u_{+}|u_{-}\rangle &= \frac{1}{2}(\langle 2| - i \langle 3|)(|2\rangle - i |3\rangle) = \frac{1}{2}(1 - 1) = 0.\end{aligned}$$

Resumo dos autovalores.

autoket simultâneo	autovalor de A	autovalor de B
$ 1\rangle$	a	b
$ u_{+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(2\rangle + i 3\rangle)$	$-a$	b
$ u_{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(2\rangle - i 3\rangle)$	$-a$	$-b$

A especificação dos autovalores caracteriza cada autoket? Sim. Nenhum dos operadores caracteriza sozinho a base: A não distingue $|u_{+}\rangle$ de $|u_{-}\rangle$ (ambos têm autovalor $-a$) e B não distingue $|1\rangle$ de $|u_{+}\rangle$ (ambos têm autovalor b). Mas os *pares* (a, b) , $(-a, b)$ e $(-a, -b)$ são dois a dois distintos, pois $a \neq 0$ e $b \neq 0$. Assim, a especificação simultânea dos autovalores de A e de B determina univocamente cada autoket (a menos da inevitável fase global): o conjunto $\{A, B\}$ constitui um conjunto completo de observáveis compatíveis para este espaço tridimensional. $\square$

Questão 12 — Operadores normais e seus autovalores

(Weinberg, Problema 3.4)

Seja A um operador linear, não necessariamente hermitiano, satisfazendo

$$[A, A^\dagger] = 0$$

(operador *normal*). Observamos primeiro que, para todo $\alpha \in \mathbb{C}$, o deslocamento por um múltiplo da identidade preserva a normalidade:

$$[A - \alpha \mathbb{1}, A^\dagger - \alpha^* \mathbb{1}] = [A, A^\dagger] = 0,$$

pois múltiplos de $\mathbb{1}$ comutam com qualquer operador; note ainda que $(A - \alpha \mathbb{1})^\dagger = A^\dagger - \alpha^* \mathbb{1}$.

a) Relação entre os autovalores de A e de $A^\dagger$

Afirmção. Se $A|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ com $|\alpha\rangle \neq 0$, então

$$A^\dagger|\alpha\rangle = \alpha^*|\alpha\rangle :$$

todo autoket de A é também autoket de $A^\dagger$, com o autovalor complexo-conjugado.

Demonstração. O adjunto do ket $(A^\dagger - \alpha^*)|\alpha\rangle$ é o bra $\langle\alpha|(A - \alpha)$. Logo, usando a normalidade na segunda igualdade e $(A - \alpha)|\alpha\rangle = 0$ na terceira,

$$\|(A^\dagger - \alpha^*)|\alpha\rangle\|^2 = \langle\alpha|(A - \alpha)(A^\dagger - \alpha^*)|\alpha\rangle = \langle\alpha|(A^\dagger - \alpha^*)(A - \alpha)|\alpha\rangle = 0.$$

Como o produto escalar é positivo-definido, um ket de norma nula é o ket nulo:

$$(A^\dagger - \alpha^*)|\alpha\rangle = 0 \implies A^\dagger|\alpha\rangle = \alpha^*|\alpha\rangle.$$

Portanto todo autoket de A é autoket de $A^\dagger$ com autovalor conjugado; e, como $A^\dagger$ também é normal, com $(A^\dagger)^\dagger = A$, o mesmo argumento aplicado a $A^\dagger$ fornece a inclusão recíproca. Assim A e $A^\dagger$ têm exatamente os mesmos autokets, e o espectro de $A^\dagger$ é o complexo-conjugado do espectro de A . Dois casos particulares conhecidos ficam unificados: se A é hermitiano ($A^\dagger = A$, trivialmente normal), então $\alpha^* = \alpha$ e os autovalores são reais; se $A = U$ é unitário (normal, pois $UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{1}$), então $A^\dagger = U^{-1}$ e $\alpha^* = \alpha^{-1}$, isto é, $|\alpha| = 1$. $\square$

b) Ortogonalidade de autokets com autovalores distintos

Sejam

$$A|\alpha_1\rangle = \alpha_1|\alpha_1\rangle, \quad A|\alpha_2\rangle = \alpha_2|\alpha_2\rangle, \quad \alpha_1 \neq \alpha_2.$$

Calculamos o elemento de matriz $\langle\alpha_1|A|\alpha_2\rangle$ de duas maneiras. Agindo com A à direita,

$$\langle\alpha_1|A|\alpha_2\rangle = \alpha_2 \langle\alpha_1|\alpha_2\rangle.$$

Agindo à esquerda: pela parte (a), $A^\dagger|\alpha_1\rangle = \alpha_1^*|\alpha_1\rangle$ e, tomando o adjunto dessa equação, $\langle\alpha_1|A = \alpha_1 \langle\alpha_1|$; logo

$$\langle\alpha_1|A|\alpha_2\rangle = \alpha_1 \langle\alpha_1|\alpha_2\rangle.$$

Subtraindo as duas expressões,

$$(\alpha_1 - \alpha_2) \langle\alpha_1|\alpha_2\rangle = 0,$$

e, como $\alpha_1 \neq \alpha_2$,

$$\langle\alpha_1|\alpha_2\rangle = 0.$$

Autokets de um operador normal associados a autovalores distintos são, portanto, ortogonais — exatamente como no caso hermitiano, ainda que os autovalores sejam complexos. (Note que aqui a parte (a) foi essencial: sem $A^\dagger|\alpha_1\rangle = \alpha_1^*|\alpha_1\rangle$ não saberíamos como A age à esquerda em $\langle\alpha_1|$.) É esse o conteúdo do teorema espectral em dimensão finita: os operadores normais são precisamente os diagonalizáveis por uma base ortonormal de autokets. $\square$

Questão 13 — Invariância sob transformações unitárias

Sejam A e B operadores relacionados por uma transformação unitária U ,

$$B = UAU^\dagger, \quad U^\dagger U = UU^\dagger = \mathbb{1}.$$

a) $\text{Tr } A = \text{Tr } B$ e $\det A = \det B$

Estabelecemos primeiro a propriedade cíclica do traço. Seja $\{|n\rangle\}$ uma base ortonormal completa, $\sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbb{1}$. Para dois operadores quaisquer X e Y ,

$$\begin{aligned} \text{Tr}(XY) &= \sum_n \langle n|XY|n\rangle = \sum_{n,m} \langle n|X|m\rangle \langle m|Y|n\rangle \\ &= \sum_{m,n} \langle m|Y|n\rangle \langle n|X|m\rangle = \sum_m \langle m|YX|m\rangle = \text{Tr}(YX), \end{aligned}$$

onde inserimos a resolução da identidade entre X e Y , trocamos a ordem dos fatores em cada termo — o que é permitido porque os elementos de matriz são números complexos e portanto comutam — e reindexamos as somas (finitas). Aplicando a propriedade cíclica com $X = UA$ e $Y = U^\dagger$,

$$\text{Tr } B = \text{Tr}(UAU^\dagger) = \text{Tr}(U^\dagger UA) = \text{Tr}(\mathbb{1} A) = \text{Tr } A.$$

Para o determinante usamos a propriedade multiplicativa $\det(XY) = \det X \det Y$. Como $\det U$ e $\det U^\dagger$ são números complexos, eles comutam entre si e com $\det A$, de modo que

$$\det B = \det(UAU^\dagger) = \det U \det A \det U^\dagger = \det A \det(U^\dagger U) = \det A \det \mathbb{1} = \det A.$$

Note que não foi preciso usar $|\det U| = 1$ separadamente: a unitariedade entra apenas através de $U^\dagger U = \mathbb{1}$. $\square$

b) Invariância de relações algébricas

Sejam $A_1, A_2, \dots$ operadores satisfazendo a relação algébrica

$$F(A_i) = c_0 \mathbb{1} + \sum_i c_i A_i + \sum_{i,j} c_{ij} A_i A_j + \dots = 0,$$

com coeficientes complexos $c_0, c_i, c_{ij}, \dots$, e defina $B_i = U A_i U^\dagger$.

Lema (covariância dos monômios). Para todo $k \geq 1$ e quaisquer índices $i_1, \dots, i_k$,

$$B_{i_1} B_{i_2} \dots B_{i_k} = U A_{i_1} A_{i_2} \dots A_{i_k} U^\dagger.$$

Demonstração por indução em k . Para $k = 1$ é a própria definição. Supondo o resultado válido para $k - 1$ fatores,

$$B_{i_1} \dots B_{i_{k-1}} B_{i_k} = (U A_{i_1} \dots A_{i_{k-1}} U^\dagger) (U A_{i_k} U^\dagger) = U A_{i_1} \dots A_{i_{k-1}} (U^\dagger U) A_{i_k} U^\dagger = U A_{i_1} \dots A_{i_k} U^\dagger,$$

pois $U^\dagger U = \mathbb{1}$. Isso conclui a indução.

O termo constante também é covariante: $c_0 \mathbb{1} = c_0 U \mathbb{1} U^\dagger = U(c_0 \mathbb{1}) U^\dagger$. Como a aplicação $X \mapsto U X U^\dagger$ é linear, ela pode ser distribuída termo a termo na soma que define F :

$$F(B_i) = c_0 \mathbb{1} + \sum_i c_i U A_i U^\dagger + \sum_{i,j} c_{ij} U A_i A_j U^\dagger + \dots = U \left(c_0 \mathbb{1} + \sum_i c_i A_i + \sum_{i,j} c_{ij} A_i A_j + \dots \right) U^\dagger,$$

isto é,

$$F(B_i) = U F(A_i) U^\dagger = U 0 U^\dagger = 0.$$

Portanto toda relação algébrica entre operadores é preservada por transformações unitárias. Em particular, relações de comutação como $[A_1, A_2] - i \mathbb{1} = 0$ (que é da forma acima, com $F = A_1 A_2 - A_2 A_1 - i \mathbb{1}$) permanecem válidas para os operadores transformados: $[B_1, B_2] = i \mathbb{1}$. É por isso que descrições relacionadas por transformação unitária são fisicamente equivalentes. $\square$

Questão 14 — Expansão de $(A - \lambda B)^{-1}$ em potências de λ

Hipóteses. Supomos A invertível, isto é, que exista A^{-1} com $AA^{-1} = A^{-1}A = \mathbb{1}$. Essa hipótese é indispensável: em $\lambda = 0$ a expressão se reduz a $(A - \lambda B)^{-1}|_{\lambda=0} = A^{-1}$, de modo que uma expansão em potências inteiras de λ em torno de $\lambda = 0$ só pode existir se A^{-1} existir. Supomos também, por ora, que $A - \lambda B$ seja invertível para λ suficientemente pequeno — o que será justificado a posteriori pela convergência da série.

Derivação da identidade básica

Seja $X \equiv (A - \lambda B)^{-1}$. Por definição,

$$(A - \lambda B)X = \mathbb{1} \quad \implies \quad AX = \mathbb{1} + \lambda BX.$$

Multiplicando à esquerda por A^{-1} obtemos a identidade exata

$$X = A^{-1} + \lambda A^{-1}BX, \quad \text{isto é,} \quad (A - \lambda B)^{-1} = A^{-1} + \lambda A^{-1}B(A - \lambda B)^{-1}.$$

Iteração

A identidade acima expressa X em termos dele próprio, com o termo autorreferente acompanhado de um fator λ extra. Substituindo a identidade nela mesma uma vez,

$$X = A^{-1} + \lambda A^{-1}B(A^{-1} + \lambda A^{-1}BX) = A^{-1} + \lambda A^{-1}BA^{-1} + \lambda^2(A^{-1}B)^2X,$$

e, após N substituições (indução imediata em N),

$$X = \sum_{n=0}^N \lambda^n (A^{-1}B)^n A^{-1} + \lambda^{N+1} (A^{-1}B)^{N+1} X.$$

O resto é de ordem λ^{N+1} ; tomando $N \rightarrow \infty$ obtemos a expansão desejada,

$$\begin{aligned} (A - \lambda B)^{-1} &= \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n (A^{-1}B)^n A^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n A^{-1} (BA^{-1})^n \\ &= A^{-1} + \lambda A^{-1}BA^{-1} + \lambda^2 A^{-1}BA^{-1}BA^{-1} + \dots \end{aligned}$$

As duas formas escritas são o mesmo produto lido de maneiras diferentes: $(A^{-1}B)^n A^{-1} = A^{-1}(BA^{-1})^n$, pois ambos são o produto alternado $A^{-1}BA^{-1}B \dots BA^{-1}$ com n fatores B e $n+1$ fatores A^{-1} .

Equivalentemente, a mesma série resulta de fatorar $A - \lambda B = A(\mathbb{1} - \lambda A^{-1}B)$ e usar a série geométrica (de Neumann) $(\mathbb{1} - \lambda C)^{-1} = \sum_{n \geq 0} \lambda^n C^n$ com $C = A^{-1}B$:

$$(A - \lambda B)^{-1} = (\mathbb{1} - \lambda A^{-1}B)^{-1} A^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n (A^{-1}B)^n A^{-1}.$$

Verificação direta

Multiplicando a série $S \equiv \sum_{n \geq 0} \lambda^n (A^{-1}B)^n A^{-1}$ à esquerda por $(A - \lambda B)$:

$$(A - \lambda B)S = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n A(A^{-1}B)^n A^{-1} - \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^{n+1} B(A^{-1}B)^n A^{-1}.$$

Na primeira soma, o termo $n = 0$ vale $AA^{-1} = \mathbb{1}$ e, para $n \geq 1$, $A(A^{-1}B)^n A^{-1} = B(A^{-1}B)^{n-1} A^{-1}$. Renomeando $n \rightarrow n + 1$ na primeira soma, seus termos com $n \geq 0$ cancelam exatamente, ordem a ordem em λ , os termos da segunda soma (série telescópica), restando

$$(A - \lambda B)S = \mathbb{1}.$$

O mesmo cálculo com a forma $S = \sum_n \lambda^n A^{-1}(BA^{-1})^n$ dá $S(A - \lambda B) = \mathbb{1}$, confirmando que S é inversa bilateral. $\square$

Discussão: convergência e não comutatividade

Convergência. Para operadores limitados num espaço de Hilbert, a norma de cada termo satisfaz $\|\lambda^n (A^{-1}B)^n A^{-1}\| \leq |\lambda|^n \|A^{-1}B\|^n \|A^{-1}\|$, de modo que a série converge em norma (comparação com série geométrica) sempre que

$$|\lambda| \|A^{-1}B\| < 1, \quad \text{em particular se} \quad |\lambda| < \frac{1}{\|A^{-1}\| \|B\|}.$$

Nesse regime, $\mathbb{1} - \lambda A^{-1}B$ é de fato invertível e, portanto, $A - \lambda B$ também é — o que justifica a posteriori a hipótese feita no início, e mostra que o resto $\lambda^{N+1}(A^{-1}B)^{N+1}X$ vai a zero em norma quando $N \rightarrow \infty$. Se A^{-1} ou B não forem limitados, a expansão deve ser entendida como série formal em potências de λ (sentido perturbativo, ordem a ordem), que é exatamente o uso que dela se faz em teoria de perturbações.

Ordem dos fatores. Em geral $[A^{-1}, B] \neq 0$, e por isso *não* é lícito reagrupar os fatores como $\lambda^n B^n A^{-(n+1)}$ ou $\lambda^n A^{-(n+1)} B^n$: a estrutura intercalada $A^{-1}BA^{-1}B \cdots BA^{-1}$ deve ser preservada. Apenas no caso particular em que $[A^{-1}, B] = 0$ a série colapsa na forma "escalar" $\sum_n \lambda^n B^n A^{-(n+1)}$, análoga a $\frac{1}{a-\lambda b} = \sum_n \lambda^n b^n / a^{n+1}$.

Questão 15 — Operadores unitários

Ao longo desta questão, U denota um operador unitário: $U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbb{1}$, de modo que U é invertível com $U^{-1} = U^\dagger$.

a) Operador unitário com $U^2 = U$

Como U é unitário, existe $U^{-1} = U^\dagger$. Multiplicando a relação $U^2 = U$ à esquerda por U^{-1} :

$$U^{-1}U^2 = U^{-1}U \implies U = \mathbb{1}.$$

Interpretação: a condição $U^2 = U$ é a condição de idempotência que define os projetores; o único projetor invertível (e, em particular, o único unitário) é a identidade, pois todo projetor $P \neq \mathbb{1}$ aniquila os vetores não nulos do subespaço sobre o qual $\mathbb{1} - P$ projeta, e portanto não é injetor. $\square$

b) Módulo dos autovalores de um operador unitário

Seja $|u_i\rangle$ um autovetor não nulo de U com autovalor u_i :

$$U|u_i\rangle = u_i|u_i\rangle, \quad \langle u_i|u_i\rangle > 0.$$

Tomando o adjunto da equação de autovalores, $\langle u_i|U^\dagger = u_i^* \langle u_i|$. Calculamos $\langle u_i|U^\dagger U|u_i\rangle$ de duas maneiras. Pela unitariedade,

$$\langle u_i|U^\dagger U|u_i\rangle = \langle u_i|\mathbb{1}|u_i\rangle = \langle u_i|u_i\rangle.$$

Pela equação de autovalores e seu adjunto,

$$\langle u_i|U^\dagger U|u_i\rangle = (u_i^* \langle u_i|)(u_i|u_i\rangle) = |u_i|^2 \langle u_i|u_i\rangle.$$

Igualando e dividindo por $\langle u_i|u_i\rangle \neq 0$:

$$|u_i|^2 = 1.$$

Os autovalores de um operador unitário vivem, portanto, no círculo unitário: $u_i = e^{i\varphi_i}$ com φ_i real. $\square$

c) Operador unitário e hermitiano

Se $U^\dagger = U$ e $U^\dagger U = \mathbb{1}$, então

$$U^2 = U^\dagger U = \mathbb{1}.$$

Seja $U|u\rangle = u|u\rangle$ com $|u\rangle \neq 0$. Aplicando U novamente, $U^2|u\rangle = u^2|u\rangle = |u\rangle$, logo $(u^2 - 1)|u\rangle = 0$ e

$$u = \pm 1.$$

De forma equivalente: a hermiticidade exige u real e o item (b) exige $|u| = 1$; a interseção é $\{+1, -1\}$. Sendo hermitiano, U é diagonalizável com autoespaços ortogonais, e pode-se escrever

$$U = P_+ - P_-, \quad P_+ + P_- = \mathbb{1},$$

com $P_\pm$ os projetores ortogonais sobre os autoespaços de ± 1 ; ou seja, todo operador simultaneamente unitário e hermitiano é da forma $U = \mathbb{1} - 2P_-$, uma "reflexão".

Exemplos. As matrizes de Pauli,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

são hermitianas e satisfazem $\sigma_k^2 = \mathbb{1}$, logo são também unitárias, com autovalores ± 1 . Outros exemplos: o operador paridade π (com $\pi^\dagger = \pi$ e $\pi^2 = \mathbb{1}$, autovalores ± 1 correspondendo a estados pares e ímpares), o operador de troca de duas partículas idênticas e, trivialmente, a própria identidade $\mathbb{1}$. $\square$

d) As partes hermitiana e anti-hermitiana de U comutam

Todo operador se decompõe de forma única em partes hermitiana e anti-hermitiana; para U escrevemos $U = A + iB$ com

$$A = \frac{U + U^\dagger}{2} = A^\dagger, \quad B = \frac{U - U^\dagger}{2i} = B^\dagger.$$

Impondo a unitariedade nas duas ordens:

$$U^\dagger U = (A - iB)(A + iB) = A^2 + B^2 + i[A, B] = \mathbb{1},$$

$$UU^\dagger = (A + iB)(A - iB) = A^2 + B^2 - i[A, B] = \mathbb{1}.$$

Subtraindo as duas equações, $2i[A, B] = 0$, isto é,

$$[A, B] = 0,$$

e somando-as,

$$A^2 + B^2 = \mathbb{1}.$$

Consequentemente U é normal:

$$[U, U^\dagger] = [A + iB, A - iB] = -2i[A, B] = 0,$$

e, pelo teorema espectral, U é diagonalizável por uma base ortonormal. Mais precisamente: A e B são hermitianos e comutam, logo admitem uma base ortonormal comum de autovetores $\{|n\rangle\}$,

$$A|n\rangle = a_n|n\rangle, \quad B|n\rangle = b_n|n\rangle, \quad a_n, b_n \in \mathbb{R},$$

e nessa base

$$U|n\rangle = (a_n + ib_n)|n\rangle.$$

De $A^2 + B^2 = \mathbb{1}$ segue, em cada autovetor, a propriedade dos autovalores:

$$a_n^2 + b_n^2 = 1,$$

ou seja, $u_n = a_n + ib_n = e^{i\theta_n}$ com $a_n = \cos \theta_n$ e $b_n = \sin \theta_n$ — em acordo com o item (b). $\square$

e) $U = A + iB$ com $[A, B] = 0$

A decomposição pedida é exatamente a construção explícita do item (d): $A = (U + U^\dagger)/2$ e $B = (U - U^\dagger)/2i$ são hermitianos e somam $U = A + iB$. A comutação pode ser verificada diretamente, sem passar pelas equações de (d): como $UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{1}$, tem-se $[U, U^\dagger] = \mathbb{1} - \mathbb{1} = 0$, e então, pela bilinearidade do comutador,

$$[A, B] = \frac{1}{4i} [U + U^\dagger, U - U^\dagger] = \frac{1}{4i} (-[U, U^\dagger] + [U^\dagger, U]) = \frac{1}{4i} (-2[U, U^\dagger]) = 0,$$

onde os termos $[U, U]$ e $[U^\dagger, U^\dagger]$ se anulam identicamente. Em palavras: A e B são combinações lineares de U e $U^\dagger = U^{-1}$, que comutam entre si; logo A e B comutam. $\square$

f) $U = e^{iF}$ com F hermitiano é unitário

Defina U pela série exponencial,

$$U = e^{iF} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(iF)^n}{n!}$$

(convergente em norma para F limitado; para F auto-adjunto não limitado a definição é feita via teorema espectral, com as mesmas conclusões). Tomando o adjunto termo a termo e usando $((iF)^n)^\dagger = ((iF)^\dagger)^n = (-iF^\dagger)^n = (-iF)^n$, pois $F^\dagger = F$:

$$U^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-iF)^n}{n!} = e^{-iF}.$$

Os operadores iF e $-iF$ comutam trivialmente, e para operadores que comutam vale $e^X e^Y = e^{X+Y}$ (o produto de Cauchy das séries reorganiza-se pelo binômio de Newton, que exige apenas $[X, Y] = 0$). Logo

$$U^\dagger U = e^{-iF} e^{iF} = e^0 = \mathbb{1}, \quad UU^\dagger = e^{iF} e^{-iF} = \mathbb{1},$$

e U é unitário. □

g) $U = A + iB = e^{iF}$: determinação de A e B

Separando a série exponencial em potências pares e ímpares, e usando $i^{2k} = (-1)^k$ e $i^{2k+1} = i(-1)^k$:

$$e^{iF} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n F^n}{n!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k F^{2k}}{(2k)!} + i \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k F^{2k+1}}{(2k+1)!} = \cos F + i \sin F,$$

onde $\cos F$ e $\sin F$ são definidos pelas respectivas séries de potências. Identificamos portanto

$$A = \cos F, \quad B = \sin F.$$

Verificação de que esta é exatamente a decomposição dos itens (d) e (e):

- A e B são hermitianos: são séries de potências de $F = F^\dagger$ com coeficientes reais, logo $A^\dagger = A$ e $B^\dagger = B$. De fato, $A = \frac{1}{2}(e^{iF} + e^{-iF}) = \frac{1}{2}(U + U^\dagger)$ e $B = \frac{1}{2i}(e^{iF} - e^{-iF}) = \frac{1}{2i}(U - U^\dagger)$, que são precisamente as partes hermitiana e anti-hermitiana de U .
- $[A, B] = 0$: ambos são funções do mesmo operador F , e quaisquer duas séries de potências de F comutam.
- $A^2 + B^2 = \cos^2 F + \sin^2 F = \mathbb{1}$: como tudo comuta, a identidade trigonométrica vale operatorialmente (multiplicação das séries, ou diretamente $\cos^2 F + \sin^2 F = \frac{1}{4}(e^{iF} + e^{-iF})^2 - \frac{1}{4}(e^{iF} - e^{-iF})^2 = \mathbb{1}$).

Na base espectral de F , com $F|f_n\rangle = f_n|f_n\rangle$ e f_n real,

$$A|f_n\rangle = \cos f_n|f_n\rangle, \quad B|f_n\rangle = \sin f_n|f_n\rangle, \quad U|f_n\rangle = e^{if_n}|f_n\rangle,$$

de modo que $a_n = \cos f_n$ e $b_n = \sin f_n$ satisfazem $a_n^2 + b_n^2 = 1$, em pleno acordo com o item (d). □

Questão 16 — Produto interno de Hilbert–Schmidt

(Nielsen & Chuang, Exercício 2.39)

Seja V um espaço de Hilbert de dimensão finita d e seja L_V o espaço vetorial (complexo) dos operadores lineares sobre V . Fixamos uma base ortonormal $\{|j\rangle\}_{j=1}^d$ de V , na qual todo $A \in L_V$ possui elementos de matriz $A_{jk} = \langle j|A|k\rangle$.

a) $(A, B) = \text{Tr}(A^\dagger B)$ é um produto interno

Linearidade no segundo argumento. Para $z, w \in \mathbb{C}$ e $A, B, C \in L_V$, a multiplicação de operadores é linear em cada fator e o traço é linear, logo

$$(A, zB + wC) = \text{Tr}(A^\dagger(zB + wC)) = z \text{Tr}(A^\dagger B) + w \text{Tr}(A^\dagger C) = z(A, B) + w(A, C).$$

Simetria conjugada. Primeiro note que, para qualquer $X \in L_V$,

$$\text{Tr}(X^\dagger) = \sum_{j=1}^d \langle j|X^\dagger|j\rangle = \sum_{j=1}^d \langle j|X|j\rangle^* = (\text{Tr } X)^*.$$

Aplicando isso a $X = B^\dagger A$ e usando $(B^\dagger A)^\dagger = A^\dagger B$,

$$(B, A)^* = [\text{Tr}(B^\dagger A)]^* = \text{Tr}[(B^\dagger A)^\dagger] = \text{Tr}(A^\dagger B) = (A, B).$$

(Das duas propriedades acima segue também a antilinearidade no primeiro argumento, como deve ser num produto interno sesquilinear.)

Positividade. Calculando na base ortonormal,

$$(A, A) = \text{Tr}(A^\dagger A) = \sum_{j=1}^d \langle j|A^\dagger A|j\rangle = \sum_{j=1}^d \|A|j\rangle\|^2 = \sum_{j,k=1}^d |A_{kj}|^2 \geq 0.$$

A igualdade $(A, A) = 0$ ocorre se e somente se $A|j\rangle = 0$ para todo j ; como $\{|j\rangle\}$ é uma base, isso equivale a $A = 0$. Portanto $(A, B) = \text{Tr}(A^\dagger B)$ é um produto interno em L_V . $\square$

b) $\dim L_V = d^2$

Defina os d^2 operadores elementares

$$E_{jk} = |j\rangle\langle k|, \quad j, k \in \{1, \dots, d\}.$$

Eles geram L_V : pela relação de completeza $\mathbb{1} = \sum_j |j\rangle\langle j|$, todo $A \in L_V$ se escreve

$$A = \mathbb{1} A \mathbb{1} = \sum_{j,k=1}^d |j\rangle\langle j| A |k\rangle\langle k| = \sum_{j,k=1}^d A_{jk} E_{jk}.$$

Eles são ortonormais (e, portanto, linearmente independentes) no produto interno do item a): como $E_{jk}^\dagger = E_{kj}$,

$$(E_{jk}, E_{lm}) = \text{Tr}(|k\rangle\langle j| |l\rangle\langle m|) = \langle j|l\rangle \text{Tr}(|k\rangle\langle m|) = \langle j|l\rangle \langle m|k\rangle = \delta_{jl} \delta_{km}.$$

De fato, se $\sum_{j,k} c_{jk} E_{jk} = 0$, então $0 = (E_{lm}, \sum_{j,k} c_{jk} E_{jk}) = c_{lm}$ para todos l, m . Assim $\{E_{jk}\}$ é uma base (ortonormal) de L_V com d^2 elementos, e

$$\dim L_V = d^2. \quad \square$$

c) Base ortonormal de matrizes hermitianas

Construímos explicitamente a família de d^2 operadores

$$D_k = E_{kk} \quad (1 \leq k \leq d), \quad S_{jk} = \frac{E_{jk} + E_{kj}}{\sqrt{2}}, \quad A_{jk} = \frac{i(E_{jk} - E_{kj})}{\sqrt{2}} \quad (1 \leq j < k \leq d).$$

Hermiticidade. Como $E_{jk}^\dagger = E_{kj}$:

$$D_k^\dagger = E_{kk} = D_k, \quad S_{jk}^\dagger = \frac{E_{kj} + E_{jk}}{\sqrt{2}} = S_{jk}, \quad A_{jk}^\dagger = \frac{-i(E_{kj} - E_{jk})}{\sqrt{2}} = A_{jk}.$$

Ortonormalidade. Usamos a sesquilinearidade do produto interno e $(E_{jk}, E_{lm}) = \delta_{jl}\delta_{km}$. Para as normas (com $j < k$, logo $(E_{jk}, E_{kj}) = 0$):

$$\begin{aligned} (D_k, D_k) &= (E_{kk}, E_{kk}) = 1, \\ (S_{jk}, S_{jk}) &= \frac{1}{2} \left[(E_{jk}, E_{jk}) + (E_{jk}, E_{kj}) + (E_{kj}, E_{jk}) + (E_{kj}, E_{kj}) \right] = \frac{1}{2} [1 + 0 + 0 + 1] = 1, \\ (A_{jk}, A_{jk}) &= \frac{(-i)(i)}{2} \left[(E_{jk}, E_{jk}) - (E_{jk}, E_{kj}) - (E_{kj}, E_{jk}) + (E_{kj}, E_{kj}) \right] = \frac{1}{2} [1 + 1] = 1. \end{aligned}$$

Para os produtos cruzados com o mesmo par $j < k$:

$$(D_l, S_{jk}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\delta_{lj}\delta_{lk} + \delta_{lk}\delta_{lj}) = 0, \quad (D_l, A_{jk}) = \frac{i}{\sqrt{2}} (\delta_{lj}\delta_{lk} - \delta_{lk}\delta_{lj}) = 0,$$

pois $j \neq k$ impede $\delta_{lj}\delta_{lk} \neq 0$; e

$$(S_{jk}, A_{jk}) = \frac{i}{2} \left[(E_{jk}, E_{jk}) - (E_{jk}, E_{kj}) + (E_{kj}, E_{jk}) - (E_{kj}, E_{kj}) \right] = \frac{i}{2} [1 - 0 + 0 - 1] = 0.$$

Finalmente, se $\{j, k\} \neq \{l, m\}$ são pares distintos, todos os produtos (E_{jk}, E_{lm}) , (E_{jk}, E_{ml}) etc. envolvidos se anulam, de modo que operadores associados a pares de índices distintos são automaticamente ortogonais.

Contagem. São

$$d + \underbrace{\frac{d(d-1)}{2}}_{S_{jk}} + \underbrace{\frac{d(d-1)}{2}}_{A_{jk}} = d + d(d-1) = d^2$$

operadores hermitianos ortonormais num espaço de dimensão d^2 (item b); logo formam uma base ortonormal de L_V constituída inteiramente de matrizes hermitianas. $\square$

Observação. Para $d = 2$ recuperamos, a menos de fases e recombinações, a base familiar: D_1, D_2 geram $\{1/\sqrt{2}, \sigma_z/\sqrt{2}\}$, enquanto $S_{12} = \sigma_x/\sqrt{2}$ e $A_{12} = -\sigma_y/\sqrt{2}$.

Questão 17 — Autovalores, autovetores e projetores de σ_y

(Cohen-Tannoudji, Diu & Laloë, *Quantum Mechanics, Vol. 1, Complemento H_{II}, Exercício 2*)

Enunciado. Num espaço vetorial de dimensão dois, considere o operador cuja matriz, numa base ortonormal $\{|1\rangle, |2\rangle\}$, se escreve

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

a) σ_y é hermitiano? Calcule seus autovalores e autovetores (dando sua expansão normalizada na base $\{|1\rangle, |2\rangle\}$). b) Calcule as matrizes que representam os projetores sobre esses autovetores. Verifique, então, que elas satisfazem as relações de ortogonalidade e de completeza (fechamento).

a) Hermiticidade, autovalores e autovetores

O adjunto é obtido transpondo e conjugando a matriz:

$$\sigma_y^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}^{\top*} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \sigma_y,$$

logo σ_y é hermitiano: seus autovalores são reais e autovetores associados a autovalores distintos são ortogonais.

A equação característica é

$$\det(\sigma_y - \lambda \mathbb{1}) = \det \begin{pmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - (-i)(i) = \lambda^2 - 1 = 0 \implies \lambda_{\pm} = \pm 1.$$

Autovetor de $\lambda_+ = +1$. Escrevendo $|+\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle$, a equação $\sigma_y|+\rangle = |+\rangle$ dá

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \implies -ib = a, \quad ia = b,$$

duas equações equivalentes à única condição $b = ia$. Normalizando, $|a|^2 + |b|^2 = 2|a|^2 = 1$, e escolhendo a fase $a = 1/\sqrt{2}$:

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + i|2\rangle).$$

Autovetor de $\lambda_- = -1$. Analogamente, $\sigma_y|-\rangle = -|-\rangle$ impõe $b = -ia$, e

$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - i|2\rangle).$$

Verificação da ortogonalidade:

$$\langle + | - \rangle = \frac{1}{2} [1 \cdot 1 + (-i)(-i)] = \frac{1}{2} (1 - 1) = 0. \quad \square$$

b) Projetores: ortogonalidade e completeza

Os projetores sobre os autovetores são $P_{\pm} = |\pm\rangle\langle\pm|$. Na base $\{|1\rangle, |2\rangle\}$, com $|\pm\rangle \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}$ e $\langle\pm| \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \mp i)$,

$$P_+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} (1 - i) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix}, \quad P_- = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} (1 + i) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}.$$

Ambas as matrizes são visivelmente hermitianas ($P_{\pm}^{\dagger} = P_{\pm}$).

Idempotência ($P_{\pm}^2 = P_{\pm}$):

$$P_+^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1+1 & -i-i \\ i+i & 1+1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} = P_+,$$

e o cálculo análogo dá $P_-^2 = P_-$.

Ortogonalidade ($P_+P_- = P_-P_+ = 0$):

$$P_+P_- = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1-1 & i-i \\ i-i & -1+1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

e $P_-P_+ = (P_+P_-)^{\dagger} = 0$. Isso reflete $\langle +|- \rangle = 0$, pois $P_+P_- = |+\rangle \langle +|- \rangle \langle -|$.

Completeza (fechamento):

$$P_+ + P_- = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{1},$$

ou seja, $|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| = \mathbf{1}$: os autovetores de σ_y formam uma base ortonormal do espaço. Como verificação final, a decomposição espectral é reconstruída:

$$\lambda_+P_+ + \lambda_-P_- = P_+ - P_- = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \sigma_y. \quad \square$$

Questão 18 — Projetores num espaço de estados tridimensional

(Cohen-Tannoudji, Diu & Laloë, *Quantum Mechanics, Vol. 1, Complemento H_{II}, Exercício 3*)

Enunciado. O espaço de estados de um certo sistema físico é tridimensional; seja $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ uma base ortonormal desse espaço. Definem-se os kets

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |u_1\rangle + \frac{i}{2} |u_2\rangle + \frac{1}{2} |u_3\rangle, \quad |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |u_1\rangle + \frac{i}{\sqrt{3}} |u_3\rangle.$$

a) Esses kets estão normalizados? b) Calcule as matrizes ρ_0 e ρ_1 que representam, na base $\{|u_i\rangle\}$, os operadores de projeção sobre o estado $|\psi_0\rangle$ e sobre o estado $|\psi_1\rangle$. Verifique que essas matrizes são hermitianas.

a) Normalização

Como a base é ortonormal, a norma ao quadrado é a soma dos módulos ao quadrado dos coeficientes:

$$\langle\psi_0|\psi_0\rangle = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 + \left|\frac{i}{2}\right|^2 + \left|\frac{1}{2}\right|^2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = 1,$$

logo $|\psi_0\rangle$ está normalizado. Já

$$\langle\psi_1|\psi_1\rangle = \left|\frac{1}{\sqrt{3}}\right|^2 + \left|\frac{i}{\sqrt{3}}\right|^2 = \frac{1}{3} + \frac{1}{3} = \frac{2}{3} \neq 1,$$

logo $|\psi_1\rangle$ não está normalizado. □

b) Matrizes dos projetores e hermiticidade

Para um ket normalizado, o projetor sobre o estado é $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$; para um ket não normalizado deve-se dividir pela norma ao quadrado,

$$P_\psi = \frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle},$$

para garantir $P_\psi^2 = P_\psi$. Em ambos os casos os elementos de matriz são $(P_\psi)_{jk} = \langle u_j | P_\psi | u_k \rangle = c_j c_k^* / \sum_l |c_l|^2$, onde $c_j = \langle u_j | \psi \rangle$.

Projetor sobre $|\psi_0\rangle$. Com $c = (\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{i}{2}, \frac{1}{2})$ e $\langle\psi_0|\psi_0\rangle = 1$, obtemos $(\rho_0)_{jk} = c_j c_k^*$:

$$\rho_0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{i}{2\sqrt{2}} & \frac{1}{2\sqrt{2}} \\ \frac{i}{2\sqrt{2}} & \frac{1}{4} & \frac{i}{4} \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} & -\frac{i}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}.$$

Projetor sobre $|\psi_1\rangle$. Com $d = (\frac{1}{\sqrt{3}}, 0, \frac{i}{\sqrt{3}})$ e $\langle\psi_1|\psi_1\rangle = \frac{2}{3}$,

$$\rho_1 = \frac{|\psi_1\rangle\langle\psi_1|}{\langle\psi_1|\psi_1\rangle} = \frac{3}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & -\frac{i}{3} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{i}{3} & 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & -\frac{i}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{i}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Hermiticidade. Em geral, para $\rho_{jk} \propto c_j c_k^*$,

$$(\rho^\dagger)_{jk} = \rho_{kj}^* \propto (c_k c_j^*)^* = c_j c_k^* \propto \rho_{jk},$$

ou seja, $\rho^\dagger = \rho$ — como deve ser, pois todo projetor ortogonal é hermitiano. Nas matrizes acima isso é visível diretamente: os elementos diagonais são reais e os elementos simétricos em relação à diagonal são complexos conjugados um do outro.

Verificações adicionais. Ambas satisfazem $\text{Tr } \rho_0 = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = 1$ e $\text{Tr } \rho_1 = \frac{1}{2} + 0 + \frac{1}{2} = 1$, como convém a projetores sobre um estado (posto 1). Além disso, a idempotência de ρ_1 confirma a necessidade do fator $3/2$:

$$\rho_1^2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & -\frac{i}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{i}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} + \frac{1}{4} & 0 & -\frac{i}{4} - \frac{i}{4} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{i}{4} + \frac{i}{4} & 0 & \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \end{pmatrix} = \rho_1,$$

e $\rho_0^2 = |\psi_0\rangle\langle\psi_0| |\psi_0\rangle\langle\psi_0| = \langle\psi_0|\psi_0\rangle |\psi_0\rangle\langle\psi_0| = \rho_0$, pois $|\psi_0\rangle$ é normalizado. □

Questão 19 — O operador $K = |\varphi\rangle\langle\psi|$

(P.2.5, Cohen-Tannoudji)

Enunciado (resumido). Sejam $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ dois vetores não nulos do espaço de estados $\mathcal{E}$, e seja K o operador linear

$$K = |\varphi\rangle\langle\psi|.$$

a) Sob que condição K é hermitiano? b) Calcule K^2 ; sob que condição K é um projetor? c) Mostre que K pode sempre ser escrito na forma $K = \lambda P_1 P_2$, onde λ é uma constante a calcular e P_1, P_2 são projetores.

a) Condição para K ser hermitiano

O adjunto de K é

$$K^\dagger = (|\varphi\rangle\langle\psi|)^\dagger = |\psi\rangle\langle\varphi|.$$

A condição $K = K^\dagger$ significa $|\varphi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\varphi|$ como operadores. Aplicando ambos os membros ao vetor $|\varphi\rangle$, obtemos

$$\langle\psi|\varphi\rangle |\varphi\rangle = \langle\varphi|\varphi\rangle |\psi\rangle \quad \implies \quad |\psi\rangle = \frac{\langle\psi|\varphi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle} |\varphi\rangle \equiv c |\varphi\rangle,$$

ou seja, $|\psi\rangle$ deve ser proporcional a $|\varphi\rangle$. Reciprocamente, se $|\psi\rangle = c |\varphi\rangle$, então $\langle\psi| = c^* \langle\varphi|$ e

$$K = c^* |\varphi\rangle\langle\varphi|, \quad K^\dagger = c |\varphi\rangle\langle\varphi|.$$

Como $|\varphi\rangle\langle\varphi| \neq 0$, tem-se $K = K^\dagger$ se e somente se $c = c^*$.

Conclusão: K é hermitiano se e somente se $|\psi\rangle = c |\varphi\rangle$ com $c \in \mathbb{R}$ (equivalentemente, $K = a |\varphi\rangle\langle\varphi|$ com a real). Nesse caso $\langle\psi|\varphi\rangle = c \|\varphi\|^2$ é real. $\square$

b) Cálculo de K^2 e condição para K ser projetor

Diretamente,

$$K^2 = |\varphi\rangle\langle\psi| |\varphi\rangle\langle\psi| = \langle\psi|\varphi\rangle |\varphi\rangle\langle\psi| = \langle\psi|\varphi\rangle K.$$

Como $K \neq 0$, a idempotência $K^2 = K$ equivale a

$$\boxed{\langle\psi|\varphi\rangle = 1}$$

(esta é a condição para K ser um projetor *obliquo*). Para que K seja um *projetor ortogonal* exige-se, além disso, que K seja hermitiano; combinando com o item a): $|\psi\rangle = c |\varphi\rangle$ com c real e

$$1 = \langle\psi|\varphi\rangle = c \|\varphi\|^2 \quad \implies \quad c = \frac{1}{\|\varphi\|^2} > 0.$$

Portanto a condição é

$$|\psi\rangle = \frac{|\varphi\rangle}{\|\varphi\|^2}, \quad \text{e então} \quad K = \frac{|\varphi\rangle\langle\varphi|}{\langle\varphi|\varphi\rangle},$$

que é exatamente o projetor ortogonal sobre a reta gerada por $|\varphi\rangle$. Em particular, se $|\varphi\rangle$ é normalizado, a condição reduz-se a $|\psi\rangle = |\varphi\rangle$ e $K = |\varphi\rangle\langle\varphi|$. $\square$

c) Decomposição $K = \lambda P_1 P_2$

Sejam P_1 e P_2 os projetores ortogonais sobre as direções de $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$, respectivamente:

$$P_1 = \frac{|\varphi\rangle\langle\varphi|}{\langle\varphi|\varphi\rangle}, \quad P_2 = \frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle}, \quad P_i^2 = P_i = P_i^\dagger.$$

O produto vale

$$P_1 P_2 = \frac{|\varphi\rangle\langle\varphi| |\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\varphi|\varphi\rangle \langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\langle\varphi|\psi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle \langle\psi|\psi\rangle} |\varphi\rangle\langle\psi| = \frac{\langle\varphi|\psi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle \langle\psi|\psi\rangle} K.$$

Logo, sempre que $\langle\varphi|\psi\rangle \neq 0$ (caso genérico),

$$K = \lambda P_1 P_2, \quad \lambda = \frac{\langle\varphi|\varphi\rangle \langle\psi|\psi\rangle}{\langle\varphi|\psi\rangle}$$

Observação (caso $\langle\varphi|\psi\rangle = 0$). Se $|\varphi\rangle \perp |\psi\rangle$, nenhuma decomposição $K = \lambda P_1 P_2$ com projetores *ortogonais* é possível. De fato, $\text{Tr } K = \langle\psi|\varphi\rangle = 0$ e, por outro lado,

$$\text{Tr}(P_1 P_2) = \text{Tr}(P_1 P_1 P_2 P_2) = \text{Tr}[(P_2 P_1)^\dagger (P_2 P_1)] \geq 0,$$

com igualdade se e somente se $P_2 P_1 = 0$, isto é, $P_1 P_2 = 0$. Assim, $\text{Tr } K = \lambda \text{Tr}(P_1 P_2) = 0$ forçaria $\lambda = 0$ ou $P_1 P_2 = 0$, e em ambos os casos $K = 0$, contradizendo $K \neq 0$. A fórmula acima vale, portanto, exatamente no caso $\langle\varphi|\psi\rangle \neq 0$. $\square$

Questão 20 — Produto de dois projetores ortogonais

(P.2.6, Cohen-Tannoudji)

Enunciado (resumido). Seja P_1 o projetor ortogonal sobre o subespaço $\mathcal{E}_1$ e P_2 o projetor ortogonal sobre o subespaço $\mathcal{E}_2$. Mostre que, para que o produto $P_1 P_2$ seja também um projetor ortogonal, é necessário e suficiente que P_1 e P_2 comutem. Nesse caso, qual é o subespaço sobre o qual $P_1 P_2$ projeta?

Lembremos a caracterização: um operador P é um projetor ortogonal se e somente se

$$P^2 = P \quad \text{e} \quad P^\dagger = P.$$

Por hipótese, $P_1^2 = P_1 = P_1^\dagger$ e $P_2^2 = P_2 = P_2^\dagger$.

a) $P_1 P_2$ é projetor ortogonal $\iff [P_1, P_2] = 0$

Necessidade. Suponha que $P_1 P_2$ seja um projetor ortogonal; em particular, é hermitiano. Então

$$P_1 P_2 = (P_1 P_2)^\dagger = P_2^\dagger P_1^\dagger = P_2 P_1 \implies [P_1, P_2] = 0.$$

Suficiência. Suponha $[P_1, P_2] = 0$, isto é, $P_1 P_2 = P_2 P_1$. Então:

(i) *Hermiticidade:*

$$(P_1 P_2)^\dagger = P_2^\dagger P_1^\dagger = P_2 P_1 = P_1 P_2.$$

(ii) *Idempotência:*

$$(P_1 P_2)^2 = P_1 (P_2 P_1) P_2 = P_1 (P_1 P_2) P_2 = P_1^2 P_2^2 = P_1 P_2.$$

Logo $P_1 P_2$ é um projetor ortogonal. Fica assim demonstrado que $P_1 P_2$ é projetor ortogonal se e somente se $[P_1, P_2] = 0$. $\square$

b) O subespaço sobre o qual $P_1 P_2$ projeta

Suponha $[P_1, P_2] = 0$ e seja $\mathcal{F} = \text{Im}(P_1 P_2)$ a imagem de $P_1 P_2$. Afirmamos que

$$\boxed{\mathcal{F} = \mathcal{E}_1 \cap \mathcal{E}_2}$$

(i) $\mathcal{F} \subseteq \mathcal{E}_1 \cap \mathcal{E}_2$. Para todo $|\chi\rangle \in \mathcal{F}$,

$$P_1 P_2 |\chi\rangle = P_1 (P_2 |\chi\rangle) \in \mathcal{E}_1, \quad P_1 P_2 |\chi\rangle = P_2 (P_1 |\chi\rangle) \in \mathcal{E}_2,$$

onde na segunda igualdade usamos a comutação. Logo todo vetor da imagem pertence simultaneamente a $\mathcal{E}_1$ e a $\mathcal{E}_2$.

(ii) $\mathcal{E}_1 \cap \mathcal{E}_2 \subseteq \mathcal{F}$, com ação identidade. Se $|v\rangle \in \mathcal{E}_1 \cap \mathcal{E}_2$, então $P_2 |v\rangle = |v\rangle$ e $P_1 |v\rangle = |v\rangle$, de modo que

$$P_1 P_2 |v\rangle = P_1 |v\rangle = |v\rangle.$$

Assim $|v\rangle \in \mathcal{F}$ e $P_1 P_2$ atua como a identidade sobre $\mathcal{E}_1 \cap \mathcal{E}_2$.

De (i) e (ii), $\mathcal{F} = \mathcal{E}_1 \cap \mathcal{E}_2$ e $P_1 P_2$ restrito a esse subespaço é a identidade. Sendo $P_1 P_2$ hermitiano e idempotente, seu núcleo é o complemento ortogonal da imagem, $\ker(P_1 P_2) = (\mathcal{E}_1 \cap \mathcal{E}_2)^\perp$. Portanto, quando P_1 e P_2 comutam, $P_1 P_2$ é o projetor ortogonal sobre a interseção $\mathcal{E}_1 \cap \mathcal{E}_2$. $\square$

Questão 21 — Os operadores L_z e S em um espaço tridimensional

(P.2.11, Cohen-Tannoudji)

Enunciado (resumido). Considere um sistema físico cujo espaço de estados é tridimensional, gerado pela base ortonormal $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$. Nessa base, definem-se os operadores L_z e S por

$$\begin{aligned} L_z |u_1\rangle &= \hbar |u_1\rangle, & L_z |u_2\rangle &= 0, & L_z |u_3\rangle &= -\hbar |u_3\rangle, \\ S |u_1\rangle &= |u_3\rangle, & S |u_2\rangle &= |u_2\rangle, & S |u_3\rangle &= |u_1\rangle. \end{aligned}$$

a) Escreva as matrizes de L_z , L_z^2 , S e S^2 na base $\{|u_i\rangle\}$; esses operadores são observáveis? b) Dê a forma da matriz mais geral de um operador que comuta com L_z ; idem para L_z^2 ; idem para S^2 . c) L_z^2 e S formam um CCOC?

a) Matrizes e caráter de observável

Na base $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$, com $(A)_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle$:

$$\begin{aligned} L_z &= \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, & L_z^2 &= \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ S &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & S^2 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{1}, \end{aligned}$$

pois $S^2 |u_1\rangle = S |u_3\rangle = |u_1\rangle$, $S^2 |u_2\rangle = |u_2\rangle$, $S^2 |u_3\rangle = |u_3\rangle$.

As quatro matrizes são reais e simétricas, logo hermitianas. Em um espaço de dimensão finita, todo operador hermitiano é diagonalizável em uma base ortonormal (teorema espectral), de modo que seus autovetores formam uma base do espaço. Portanto L_z , L_z^2 , S e S^2 são todos observáveis. (L_z e L_z^2 já estão diagonais; a base própria ortonormal de S é exibida no item c); $S^2 = \mathbf{1}$ é trivialmente observável.) $\square$

b) Matrizes que comutam com L_z , com L_z^2 e com S^2

Lema. Se A é diagonal na base $\{|u_i\rangle\}$, $A = \text{diag}(a_1, a_2, a_3)$, e $M = (m_{ij})$ é arbitrário, então

$$([M, A])_{ij} = m_{ij} (a_j - a_i),$$

de modo que $[M, A] = 0$ se e somente se $m_{ij} = 0$ sempre que $a_i \neq a_j$. Em outras palavras, M deve deixar invariante cada autoespaço de A : M só pode ter elementos de matriz entre vetores de base associados ao mesmo autovalor de A .

Comutação com L_z : os autovalores $(\hbar, 0, -\hbar)$ são todos distintos (espectro não degenerado), logo todos os elementos fora da diagonal se anulam:

$$M = \begin{pmatrix} m_1 & 0 & 0 \\ 0 & m_2 & 0 \\ 0 & 0 & m_3 \end{pmatrix}, \quad m_1, m_2, m_3 \text{ arbitrários}$$

(3 parâmetros complexos): todo operador que comuta com L_z é diagonal na base $\{|u_i\rangle\}$.

Comutação com L_z^2 : os autovalores são $(\hbar^2, 0, \hbar^2)$, com $a_1 = a_3 \neq a_2$; anulam-se apenas $m_{12}, m_{21}, m_{23}, m_{32}$, e o bloco $\{|u_1\rangle, |u_3\rangle\}$ fica livre:

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & 0 & m_{13} \\ 0 & m_{22} & 0 \\ m_{31} & 0 & m_{33} \end{pmatrix}$$

(5 parâmetros complexos): M preserva os autoespaços $\text{span}\{|u_1\rangle, |u_3\rangle\}$ e $\text{span}\{|u_2\rangle\}$ de L_z^2 . Note que a degenerescência de L_z^2 alarga a família de operadores que comutam com ele.

Comutação com S^2 : como $S^2 = \mathbb{1}$, todo operador comuta com S^2 ; a matriz mais geral é uma matriz 3×3 completamente arbitrária (9 parâmetros complexos). $\square$

c) $\{L_z^2, S\}$ é um CCOC?

Primeiro, $[L_z^2, S] = 0$: a matriz de S tem exatamente a forma geral encontrada no item b) para os operadores que comutam com L_z^2 ($m_{13} = m_{31} = 1$, $m_{22} = 1$, demais nulos). Verificação direta:

$$L_z^2 S = \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = S L_z^2.$$

Ambos são observáveis (item a)), logo admitem base ortonormal comum de autovetores. Construamos essa base diagonalizando S dentro de cada autoespaço de L_z^2 :

- No autoespaço $\text{span}\{|u_1\rangle, |u_3\rangle\}$ (autovalor $\hbar^2$ de L_z^2), S restringe-se a $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, cujos autovetores são

$$|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_1\rangle + |u_3\rangle), \quad S|p\rangle = +|p\rangle; \quad |m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_1\rangle - |u_3\rangle), \quad S|m\rangle = -|m\rangle.$$

- No autoespaço $\text{span}\{|u_2\rangle\}$ (autovalor 0 de L_z^2), já se tem $S|u_2\rangle = +|u_2\rangle$.

A base ortonormal comum e os pares de autovalores são

vetor	L_z^2	S
$ p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_1\rangle + u_3\rangle)$	$\hbar^2$	+1
$ m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_1\rangle - u_3\rangle)$	$\hbar^2$	-1
$ u_2\rangle$	0	+1

Os três pares $(\hbar^2, +1)$, $(\hbar^2, -1)$ e $(0, +1)$ são *todos distintos*: a cada par de autovalores corresponde um único autovetor comum (a menos de um fator de fase). Portanto a base comum é única (a menos de fases) e

$\{L_z^2, S\} \text{ é um CCOC.}$

Observe que nenhum dos dois operadores sozinho é um CCOC: L_z^2 tem o autovalor $\hbar^2$ duplamente degenerado, e S tem o autovalor +1 duplamente degenerado; é a especificação *conjunta* dos dois autovalores que remove toda ambiguidade. $\square$

Questão 22 — Os observáveis H e B e a noção de CCOC

(P.2.12, Cohen-Tannoudji)

Enunciado (resumido). No mesmo espaço de estados tridimensional, com base ortonormal $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$, definem-se os operadores H e B pelas matrizes

$$H = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad B = b \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

onde ω_0 e b são constantes reais (supomos $\omega_0 \neq 0$ e $b \neq 0$). a) H e B são hermitianos? São observáveis? b) Mostre que H e B comutam e dê uma base de autovetores comuns. c) Dentre os conjuntos $\{H\}$, $\{B\}$, $\{H, B\}$ e $\{H^2, B\}$, quais formam um CCOC?

a) Hermiticidade e caráter de observável

As duas matrizes são reais e simétricas, e os fatores $\hbar\omega_0$ e b são reais; logo

$$H^\dagger = H, \quad B^\dagger = B :$$

ambos são hermitianos. Em dimensão finita, todo operador hermitiano é diagonalizável em uma base ortonormal (teorema espectral), isto é, seus autovetores formam uma base do espaço de estados. Portanto H e B são observáveis (a base própria comum é exibida explicitamente no item b)). $\square$

b) Comutação e base de autovetores comuns

Calculemos os dois produtos:

$$HB = \hbar\omega_0 b \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \hbar\omega_0 b \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix},$$
$$BH = \hbar\omega_0 b \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \hbar\omega_0 b \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Logo

$$[H, B] = HB - BH = 0.$$

Estruturalmente: na decomposição $\text{span}\{|u_1\rangle\} \oplus \text{span}\{|u_2\rangle, |u_3\rangle\}$, ambos os operadores são bloco-diagonais e, no bloco $\{|u_2\rangle, |u_3\rangle\}$, H reduz-se a $2\hbar\omega_0 \mathbb{1}$, que comuta com qualquer operador do bloco.

Sendo $[H, B] = 0$ e ambos observáveis, existe base ortonormal comum. Basta diagonalizar B dentro do autoespaço degenerado de H : no bloco $\{|u_2\rangle, |u_3\rangle\}$, B reduz-se a $b \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, com autovetores $(|u_2\rangle \pm |u_3\rangle)/\sqrt{2}$ e autovalores $\pm b$. Obtemos a base ortonormal comum

$$|v_1\rangle = |u_1\rangle, \quad |v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_2\rangle + |u_3\rangle), \quad |v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_2\rangle - |u_3\rangle),$$

com

$$\begin{aligned} H|v_1\rangle &= \hbar\omega_0 |v_1\rangle, & B|v_1\rangle &= b|v_1\rangle, \\ H|v_2\rangle &= 2\hbar\omega_0 |v_2\rangle, & B|v_2\rangle &= +b|v_2\rangle, \\ H|v_3\rangle &= 2\hbar\omega_0 |v_3\rangle, & B|v_3\rangle &= -b|v_3\rangle. \end{aligned}$$

Verificação imediata: $B|v_2\rangle = b(|u_3\rangle + |u_2\rangle)/\sqrt{2} = +b|v_2\rangle$ e $B|v_3\rangle = b(|u_3\rangle - |u_2\rangle)/\sqrt{2} = -b|v_3\rangle$. $\square$

c) Quais conjuntos formam um CCOC?

Um conjunto de observáveis que comutam é um CCOC quando a especificação dos autovalores de *todos* os operadores do conjunto determina um único autovetor comum (a menos de fator multiplicativo). Reunimos os autovalores na base comum $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, |v_3\rangle\}$, incluindo $H^2 = (\hbar\omega_0)^2 \text{diag}(1, 4, 4)$:

vetor	H	H^2	B
$ v_1\rangle$	$\hbar\omega_0$	$(\hbar\omega_0)^2$	b
$ v_2\rangle$	$2\hbar\omega_0$	$4(\hbar\omega_0)^2$	b
$ v_3\rangle$	$2\hbar\omega_0$	$4(\hbar\omega_0)^2$	$-b$

- $\{H\}$: o autovalor $2\hbar\omega_0$ é duplamente degenerado; dar o autovalor de H não distingue $|v_2\rangle$ de $|v_3\rangle$ (qualquer combinação linear de ambos é autovetor). *Não é CCOC.*
- $\{B\}$: o autovalor $+b$ é duplamente degenerado ($|v_1\rangle$ e $|v_2\rangle$). *Não é CCOC.*
- $\{H, B\}$: os pares $(\hbar\omega_0, b)$, $(2\hbar\omega_0, +b)$ e $(2\hbar\omega_0, -b)$ são todos distintos; cada par determina um único vetor da base comum. *É um CCOC.*
- $\{H^2, B\}$: como $[H^2, B] = H[H, B] + [H, B]H = 0$, os operadores comutam, e os pares $((\hbar\omega_0)^2, b)$, $(4(\hbar\omega_0)^2, +b)$ e $(4(\hbar\omega_0)^2, -b)$ são todos distintos. *É um CCOC.*

Em resumo: apenas $\{H, B\}$ e $\{H^2, B\}$ são CCOC; $\{H\}$ e $\{B\}$, isoladamente, não removem as degenerescências. (Se $\omega_0 = 0$ ou $b = 0$, novas degenerescências surgem e nenhum dos conjuntos acima seria um CCOC.) $\square$