Transformações lineares no esp. de funções e base contínua

- Para uma dada matrix $n \times n$ $\hat{A}$, a equação

$$\vec{y}' = \hat{A}\vec{y}, \quad \forall y \in V$$

define a ação do operador $\hat{A}$ no espaço vetorial V:

$$\begin{aligned} \hat{A} : V &\to V \\ \vec{y} &\to \vec{y}' = \hat{A}\vec{y} \end{aligned}$$

- Um espaço de funções (por exemplo funções de quadrado integrável) forma um espaço vetorial (de dimensão infinita) onde as funções desempenham o papel de vetores.

- Se funções são os vetores, o que faz o papel de operador linear nesse espaço de dimensão infinita?
- Uma resposta é

$$f(x) = \int dx' K(x, x') g(x'), \; f, g \in \Omega$$

onde $K(x, x')$ se chama o kernel do operador integral K:

$$\begin{aligned} K : \Omega &\to \Omega \\ g(x) &\to f(x) \end{aligned}$$

- Exercício: Prove que K é um operação linear.

Transformações lineares no esp. de funções e base contínua

- Para uma dada matrix $n \times n$ $\hat{A}$, a equação

$$\vec{y}' = \hat{A}\vec{y}, \quad \forall y \in V$$

define a ação do operador $\hat{A}$ no espaço vetorial V:

$$\hat{A} : V \to V$$
$$\vec{y} \to \vec{y}' = \hat{A}\vec{y}$$

- Um espaço de funções (por exemplo funções de quadrado integrável) forma um espaço vetorial (de dimensão infinita) onde as funções desempenham o papel de vetores.

- Se funções são os vetores, o que faz o papel de operador linear nesse espaço de dimensão infinita?

- Uma resposta é

$$f(x) = \int dx' K(x, x') g(x'), \; f, g \in \Omega$$

onde $K(x, x')$ se chama o kernel do operador integral K:

$$K : \Omega \to \Omega$$
$$g(x) \to f(x)$$

- Exercício: Prove que Ké um operação linear.

Bases

- Para um espaço de dimensão finita n, pode escrever a operação em relação de um base

$$\vec{y}' = \hat{A}\vec{y}; \quad \rightarrow y_i' = \sum_{k=1}^{n} A_{ik} y_k$$

onde y_i é o componente de y na base $\vec{e}_i$

$$y_i = \vec{e}_i^T \cdot \vec{y}$$

e a base ortonormal é

$$\{\vec{e}_i, i = 1, \ldots, n\}$$

com

$$\vec{e}_i^T \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij}$$

- Podemos também expressar funções e operações lineares em relação de um base

Notação de Dirac

- Vetores são denotados como

$$\vec{y} \to |y\rangle$$
$$\vec{e}_i \to |i\rangle$$
$$\vec{e}_i^{\,T} \to \langle i|$$

- O produto escalar entre $\vec{a}$ e $\vec{b}$ fica

$$\vec{a}^{\,T} \cdot \vec{b} \to \langle a|b\rangle.$$

- Assim, o i-ésimo componente de $|y\rangle$ na base $|i\rangle$ é

$$y_i = \langle i|y\rangle$$

e a condição de ortonormalidade fica

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$$

Notação de Dirac

$$y_i = \langle i|y\rangle, \qquad \langle i|j\rangle = \delta_{ij}$$

- Decompomos um vetor qualquer $|a\rangle$ assim: $\quad |a\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i |i\rangle,$

  mas $a_i = \langle i|a\rangle$. Assim,

$$|a\rangle = \sum_{i=1}^{n} |i\rangle a_i = \sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i|a\rangle = \left[\sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i|\right] |a\rangle$$

- Esse objeto $\sum |i\rangle\langle i|$ é uma matriz $n \times n$ (diagonal) que leva um vetor qualquer $|a\rangle \in V$ nele mesmo. Concluímos assim que é a representação da matriz identidade $\mathbb{1}$ nessa base $\{|i\rangle, i = 1, \ldots, n\}$:

$$\sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i| = \mathbb{1}$$

Notação de Dirac

- Como encontramos os elementos de um operador $\hat{A}$ numa base $|i\rangle$?

$$\hat{A} = \mathbb{1}\hat{A}\mathbb{1} = \sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i|\hat{A}\sum_{k=1}^{n}|k\rangle\langle k|$$
$$= \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}|i\rangle\langle i|\hat{A}|k\rangle\langle k| = \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} A_{ik}|i\rangle\langle k|$$

onde $A_{ik} = \langle i|\hat{A}|k\rangle$ são elementos (números) do operador A na base $|i\rangle$.

- Se $\hat{A}$ é diagonal em $|i\rangle$, por exemplo, obtemos

$$A_{ik} = \langle i|\hat{A}|k\rangle = A_i\langle i|k\rangle = A_i\delta_{ik}.$$

- Toda a notação vale também para qualquer espaço vetorial, incluindo espaços de funções, de dimensão enumerável (finito ou infinito $n \to \infty$). Por exemplo, o conjunto de funções periódicos, com base $\{\cos(nx), \mathrm{sen}(nx); n = 0, 1, 2, \ldots\}$.

Notação de Dirac: base contínua

- É também possível ter um espaço com base não enumerável, ou continua, com algumas diferenças:
- Vamos associar a notação vetorial para uma função $f(x)$ como

$$f(x) \to |f\rangle$$

- Supomos agora que existe uma base contínua $\{|x\rangle, -\infty < x < \infty\}$ tal que $\quad f(x) = \langle x|f\rangle$
  ou seja, $f(x)$ é o coeficiente de $|f\rangle$ na base $|x\rangle$, e

$$|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle f(x')$$

$$\langle x|f\rangle = f(x) = \langle x| \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle f(x') = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle x|x'\rangle f(x'),$$

  o que corresponderia para um vetor n-dimensional

$$x_i = \vec{e}_i^{\,T} \cdot \sum_{i=1}^{n} \vec{e}_j x_j = \sum_{i=1}^{n} \left(\vec{e}_i^{\,T} \cdot \vec{e}_j\right) x_j.$$

Notação de Dirac: base contínua

- Supomos agora que existe uma base contínua $\{|x\rangle, -\infty < x < \infty\}$ tal que $\quad f(x) = \langle x|f\rangle$
ou seja, $f(x)$ é o coeficiente de $|f\rangle$ na base $|x\rangle$, e

$$|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle f(x')$$

$$\langle x|f\rangle = f(x) = \langle x| \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle f(x') = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle x|x'\rangle f(x'),$$

o que corresponderia para um vetor n-dimensional

$$x_i = \vec{e}_i^T \cdot \sum_{i=1}^{n} \vec{e}_j x_j = \sum_{i=1}^{n} \left(\vec{e}_i^T \cdot \vec{e}_j\right) x_j.$$

- O fato de que $\left(\vec{e}_i^T \cdot \vec{e}_j\right) = \delta_{ij}$ e as propriedade da delta de Dirac indicam que

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$$

Notação de Dirac: Relação de completeza

$$
\begin{aligned}
|f\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle\langle x|f\rangle \\
&= \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle\langle x|\right) |f\rangle \\
&= \mathbb{1}|f\rangle
\end{aligned}
$$

ou seja

$$
\int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle\langle x| = \mathbb{1}
$$

é o operador identidade no espaço das funções. I.e., em vez de uma soma, no caso de espaço finito, temos um integral.

Notação de Dirac: Produto escalar

- Sejam $|f\rangle$ e $|g\rangle$ dois vetores no espaço de funções complexas. Vamos definir um produto escalar entre os vetores (i.e., as funções)

$$\langle f|g\rangle \in \mathbb{C}$$

$$\mathbb{1}|g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|x\rangle\langle x|g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|x\rangle g(x)$$

$$\langle f|g\rangle = \langle f|\mathbb{1}|g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\langle f|x\rangle g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f^*(x)g(x)$$

- Note que $\langle f|x\rangle = \langle x|f\rangle^* = f^*(x)$
- Isso segue pois a norma de um vetor deve ser um número real não-negativo:

$$|f|^2 = \langle f|f\rangle = \langle f|f\rangle^* = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|f(x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f^*(x)f(x) \geq 0$$

- Note que a imposição de que $\langle f|f\rangle$ seja finito restringe a discussão ao espaço de funções de quadrado integrável.

Notação de Dirac: Produto escalar

- Sejam $|f\rangle$ e $|g\rangle$ dois vetores no espaço de funções complexas. Vamos definir um produto escalar entre os vetores (i.e., as funções)

$$\langle f|g\rangle \in \mathbb{C}$$

$$\mathbb{1}|g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\rangle\langle x|g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\rangle g(x)$$

$$\langle f|g\rangle = \langle f|\mathbb{1}|g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \langle f|x\rangle g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f^*(x) g(x)$$

- Note que $\langle f|x\rangle = \langle x|f\rangle^* = f^*(x)$
- Isso segue pois a norma de um vetor deve ser um número real não-negativo:

$$|f|^2 = \langle f|f\rangle = \langle f|f\rangle^* = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |f(x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f^*(x) f(x) \geq 0$$

- Note que a imposição de que $\langle f|f\rangle$ seja finito restringe a discussão ao espaço de funções de quadrado integrável.

Notação de Dirac: Produto escalar

- Sejam $|f\rangle$ e $|g\rangle$ dois vetores no espaço de funções complexas. Vamos definir um produto escalar entre os vetores (i.e., as funções)

$$\langle f|g\rangle \in \mathbb{C}$$

$$\mathbb{1}|g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|x\rangle\langle x|g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|x\rangle g(x)$$

$$\langle f|g\rangle = \langle f|\mathbb{1}|g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\langle f|x\rangle g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f^*(x)g(x)$$

- Note que $\quad \langle f|x\rangle = \langle x|f\rangle^* = f^*(x)$
- Isso segue pois a norma de um vetor deve ser um número real não-negativo:

$$|f|^2 = \langle f|f\rangle = \langle f|f\rangle^* = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|f(x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f^*(x)f(x) \geq 0$$

- Note que a imposição de que $\langle f|f\rangle$ seja finito restringe a discussão ao espaço de funções de quadrado integrável.

Notação de Dirac: Produto escalar

- A equação para o kernel $\quad f(x) = \int dx' K(x,x') g(x')$

  fica, nessa representação $\quad |f\rangle = \hat{K}|g\rangle.$
- De fato

$$\langle x|f\rangle = \langle x|\hat{K}|g\rangle = \langle x|\hat{K}\mathbb{1}|g\rangle = \langle x|\hat{K}\left[\int_{-\infty}^{\infty} dx'\,|x'\rangle\langle x'|\right]|g\rangle$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle x|\hat{K}|x'\rangle\langle x'|g\rangle$$

  ou seja

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' K(x,x') g(x')$$

  com $K(x,x')$ o elemento do operador $\hat{K}$ na base $\{|x\rangle, -\infty < x < \infty\}$:

$$K(x,x') = \langle x|\hat{K}|x'\rangle,$$

- Analogamente, $\quad \langle x|\mathbb{1}|x'\rangle = \delta(x-x'), \quad$ ou seja, a Delta de Dirac dá os elementos do operador unidade $\mathbb{1}$ na base $|x\rangle$.

Notação de Dirac: Produto escalar

- A equação para o kernel $\quad f(x) = \int dx' K(x,x') g(x')$

  fica, nessa representação $\qquad |f\rangle = \hat{K}|g\rangle.$
- De fato

$$\langle x|f\rangle = \langle x|\hat{K}|g\rangle = \langle x|\hat{K}\mathbb{1}|g\rangle = \langle x|\hat{K}\left[\int_{-\infty}^{\infty} dx'\, |x'\rangle\langle x'|\right]|g\rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle x|\hat{K}|x'\rangle\langle x'|g\rangle$$

  ou seja

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' K(x,x') g(x')$$

  com $K(x,x')$ o elemento do operador $\hat{K}$ na base $\{|x\rangle, -\infty < x < \infty\}$:

$$K(x,x') = \langle x|\hat{K}|x'\rangle,$$

- Analogamente, $\quad \langle x|\mathbb{1}|x'\rangle = \delta(x-x'), \quad$ ou seja, a Delta de Dirac dá os elementos do operador unidade $\mathbb{1}$ na base $|x\rangle$.

Notação de Dirac: Produto escalar

- De fato

$$\langle x|f\rangle = \langle x|\hat{K}|g\rangle = \langle x|\hat{K}\mathbb{1}|g\rangle = \langle x|\hat{K}\left[\int_{-\infty}^{\infty} dx'\,|x'\rangle\langle x'|\right]|g\rangle$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle x|\hat{K}|x'\rangle\langle x'|g\rangle$$

ou seja

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' K(x,x')g(x')$$

com $K(x,x')$ o elemento do operador $\hat{K}$ na base $\{|x\rangle, -\infty < x < \infty\}$:

$$K(x,x') = \langle x|\hat{K}|x'\rangle,$$

- Analogamente, $\langle x|\mathbb{1}|x'\rangle = \delta(x-x')$, ou seja, a Delta de Dirac dá os elementos do operador unidade $\mathbb{1}$ na base $|x\rangle$.
- Note que $K(x,x')$ será em geral uma distribuição.

Operador diferencial como Kernel

- Para uma função diferenciável, $f'(x) = \dfrac{df(x)}{dx}$ existe. Podemos escrever isso da seguinte forma

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dx}f(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx'\delta(x-x')\frac{d}{dx'}f(x') \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left\{ \frac{d}{dx'}\left[\delta(x-x')f(x')\right] - f(x')\frac{d}{dx'}\delta(x-x') \right\} \\
&= \cancelto{0}{\left.\left[\delta(x-x')f(x')\right]\right|_{-\infty}^{\infty}} - \int_{-\infty}^{\infty} dx'\, f(x')\frac{d}{dx'}\delta(x-x') \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx'\, f(x')\frac{d}{dx}\delta(x-x')
\end{aligned}
$$

ou, seja,

$$
\delta(x-x')\frac{d}{dx'} = \frac{d}{dx}\delta(x-x')
$$

(no sentido de distribuições).

Operador diferencial como Kernel

- Para o vetor $|f\rangle = |df/dx\rangle$ com componente $\langle x|f'\rangle = f'(x)$, temos

$$|f'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|x\rangle f'(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|x\rangle \int_{-\infty}^{\infty} dx'\, f(x')\frac{d}{dx}\delta(x-x')$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx'\,|x\rangle \frac{d}{dx}\delta(x-x')\langle x'|f\rangle$$
$$= \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx'\,|x\rangle \frac{d}{dx}\delta(x-x')\langle x'|\right]|f\rangle$$

- Assim, faz sentido definir o operador

$$\hat{D} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx'\,|x\rangle \frac{d}{dx}\delta(x-x')\langle x'|$$

e escrever $|f'\rangle = \hat{D}|f\rangle$, onde $\langle x|\hat{D}|x'\rangle = \dfrac{d\delta(x-x')}{dx}$ são os elementos de $\hat{D}$ na base dos $|x\rangle$.

Exercícios interessantes

- *Mostre que

$$\langle x|\hat{D}^n|x'\rangle \equiv \langle x|\underbrace{\hat{D}\hat{D}\dots}_{nvezes}|x'\rangle = \frac{d^n}{dx^n}\delta(x-x')$$

  e

$$\langle x|\hat{D}^n|f\rangle = \frac{d^n}{dx^n}f(x).$$

- *Para um número "a" definimos a exponencial do operador diferencial $\hat{D}$ como

$$e^{a\hat{D}} = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{a^n\hat{D}^n}{n!}$$

  (i.e., via série de Taylor). Mostre que

$$\langle x|e^{a\hat{D}}|f\rangle = f(x+a)$$

Transformada de Fourier como mudança de base no espaço de funções

- Se a norma $\langle f|f\rangle$ é finito, então $\int_{-\infty}^{\infty} dx\,|f(x)|^2$ é finito. Então, a transformada de Fourier existe e pela identidade de Parseval

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\,|f(x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dk\,|\tilde{f}(k)|^2$$

- Assim, vemos que deve existir uma base $\{|k\rangle, -\infty < k < \infty\}$ onde

$$\langle f|f\rangle = \langle f|\mathbb{1}|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dk\langle f|k\rangle\langle k|f\rangle$$

  e

$$\langle k|f\rangle = \tilde{f}(k)$$

- Porém,

$$\langle k|\mathbb{1}|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\langle k|x\rangle\langle x|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\langle k|x\rangle f(x).$$

- Comparando com a transformada de Fourier, temos que

Transformada de Fourier como mudança de base no espaço de funções

- Assim, vemos que deve existir uma base $\{|k\rangle, -\infty < k < \infty\}$ onde

$$\langle f|f\rangle = \langle f|\mathbb{1}|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dk \langle f|k\rangle\langle k|f\rangle$$

  e

$$\langle k|f\rangle = \tilde{f}(k)$$

- Porém,

$$\langle k|\mathbb{1}|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle k|x\rangle\langle x|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle k|x\rangle f(x).$$

- Comparando com a transformada de Fourier, temos que

$$\langle k|x\rangle = \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{2\pi}}$$

  é o elemento da matriz mudança da base $|x\rangle$ para $|k\rangle$.