

# 03\_operators

August 20, 2019

```
In [2]: import platform
        if platform.system() == 'Linux':
            %run '/home/jonas/Dropbox/GitHub/algebra_linear/init.ipynb'
        else:
            %run '/Users/jonasmaziero/Dropbox/GitHub/algebra_linear/init.ipynb'
```

## 1 Operadores lineares

Um *operador linear* é qualquer função  $A : V \rightarrow W$  (leva vetores do espaço vetorial  $V$  para o espaço vetorial  $W$ ) que é linear no seu domínio. Ou seja, para  $c_j \in \mathbb{F}$  e  $|v_j\rangle \in V$  devemos ter

$$A(\sum_j c_j |v_j\rangle) = \sum_j c_j A(|v_j\rangle). \quad (1)$$

Além disso, exigiremos que se  $A, B : V \rightarrow W$  são operadores lineares, então  $\forall |v\rangle \in V$  devemos ter

$$(A + B)(|v\rangle) = A(|v\rangle) + B(|v\rangle). \quad (2)$$

OBS: Quando  $A : V \rightarrow V$  dizemos que  $A$  está definido em  $V$ . OBS: Dois operadores lineares particularmente importantes são o operador identidade, definido por

$$\mathbb{I}_V |v\rangle = |v\rangle, \forall |v\rangle \in V, \quad (3)$$

e o operador nulo, definido por

$$0 |v\rangle = |\emptyset\rangle, \forall |v\rangle \in V. \quad (4)$$

OBS: Como qualquer vetor  $|v\rangle \in V$  pode ser escrito como uma combinação linear dos vetores de uma certa base  $\{|w_j\rangle\}_{j=1}^{\dim V}$ , i.e.,  $|v\rangle = \sum_j c_j |w_j\rangle$  com  $c_j \in \mathbb{F}$ , se sabemos como um certo operador linear atua em uma base qualquer de  $V$ , sabemos como ele atua em todos os vetores de  $V$  pois

$$A(|v\rangle) = A(\sum_j c_j |w_j\rangle) = \sum_j c_j A(|w_j\rangle). \quad (5)$$

### 1.0.1 Matrizes são operadores lineares

Considere matrizes retangulares  $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ . Não é difícil ver que para  $|v\rangle \in \mathbb{C}^n$  e  $|v'\rangle \in \mathbb{C}^m$  teremos

$$\begin{bmatrix} |v'\rangle_1 \\ |v'\rangle_2 \\ \vdots \\ |v'\rangle_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & \cdots & A_{1,n} \\ A_{2,1} & A_{2,2} & \cdots & A_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{m,1} & A_{m,2} & \cdots & A_{m,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |v\rangle_1 \\ |v\rangle_2 \\ \vdots \\ |v\rangle_n \end{bmatrix} \quad (6)$$

ou, equivalentemente, (7)

$$|v'\rangle_j = \sum_{k=1}^n A_{j,k} |v\rangle_k \text{ para } j = 1, \dots, m \quad (8)$$

ou, equivalentemente, (9)

$$|v'\rangle = A|v\rangle. \quad (10)$$

Ou seja,  $A : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^m$ . Para verificar linearidade consideremos  $|w\rangle, |w_j\rangle \in \mathbb{C}^n$ ,  $c_j \in \mathbb{C}$  e  $|w\rangle = \sum_j c_j |w_j\rangle$  e olhemos para

$$(A|w\rangle)_k = (A \sum_j c_j |w_j\rangle)_k \quad (11)$$

$$= \sum_l A_{k,l} |w\rangle_l = \sum_l A_{k,l} \sum_j c_j |w_j\rangle_l \quad (12)$$

$$= \sum_j c_j \sum_l A_{k,l} |w_j\rangle_l = \sum_j c_j (A|w_j\rangle)_k, \quad (13)$$

o que implica que  $A(\sum_j c_j |w_j\rangle) = \sum_j c_j A(|w_j\rangle)$  e portanto que matrizes são operadores lineares. Ademais,

$$\mathbb{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \text{ e } e = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}. \quad (14)$$

### 1.0.2 Representação matricial de operadores lineares

Consideremos  $A : V \rightarrow W$  e duas bases  $\{|v_j\rangle\}_{j=1}^{\dim V}$  de  $V$  e  $\{|w_k\rangle\}_{k=1}^{\dim W}$  de  $W$ . Sabemos que  $A$  atuando em um vetor de  $V$  retorna um vetor de  $W$ , i.e.,  $A(|v_j\rangle) \in W$ , que por sua vez pode ser escrito como uma combinação linear dos vetores de qualquer uma das bases de  $W$ . Então, para  $j = 1, \dots, \dim V$ , podemos escrever

$$A(|v_j\rangle) = \sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j} |w_k\rangle, \quad (15)$$

onde os coeficientes da combinação linear,  $A_{k,j} \in \mathbb{F}$ , fornecem a representação matricial de  $A$ .

*OBS:* Note que fizemos o mesmo para vetores. Ou seja, se na base  $\{|w_k\rangle\}_{k=1}^{\dim W}$  o vetor  $|w\rangle \in W$  é escrito como  $|w\rangle = \sum_{j=1}^{\dim W} c_j |w_j\rangle$  dizemos que os coeficientes  $c_j \in \mathbb{F}$  fornecem a representação matricial de  $|w\rangle$  naquela base.

**Exemplo** Considere a base  $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$  e  $A : V \rightarrow V$  que atua como segue:

$$A(|e_1\rangle) = |e_2\rangle \text{ e } A(|e_2\rangle) = |e_1\rangle. \quad (16)$$

Teremos assim que

$$A(|e_1\rangle) = \sum_{k=1}^2 A_{k,1}|e_k\rangle = A_{1,1}|e_1\rangle + A_{2,1}|e_2\rangle \quad (17)$$

$$A(|e_2\rangle) = \sum_{k=1}^2 A_{k,2}|e_k\rangle = A_{1,2}|e_1\rangle + A_{2,2}|e_2\rangle. \quad (18)$$

Então, comparando a definição com estas últimas relações teremos

$$A \doteq \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} \\ A_{2,1} & A_{2,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (19)$$

**Exercício:** Considere a base  $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$  e  $B : V \rightarrow V$  que atua como segue:  $B(|e_1\rangle) = (|e_1\rangle + |e_2\rangle)/\sqrt{2}$  e  $B(|e_2\rangle) = (|e_1\rangle - |e_2\rangle)/\sqrt{2}$ . Forneça a representação matricial de  $B$  nesse caso.

### 1.0.3 Composição de operadores lineares

Consideremos operadores lineares  $A : V \rightarrow W$  e  $B : W \rightarrow X$  e as seguintes bases para estes espaços vetoriais:  $\{|v_j\rangle\}_{j=1}^{\dim V} \in V$ ,  $\{|w_j\rangle\}_{j=1}^{\dim W} \in W$  e  $\{|x_j\rangle\}_{j=1}^{\dim X} \in X$ . Quando atuamos primeiro  $A$  e depois  $B$  (notação:  $B \circ A$ ) veremos que isso é equivalente a aplicar um único operador linear  $C : V \rightarrow X$ , cuja representação matricial pode ser obtida daquelas de  $A$  e de  $B$ . Explicitando, para  $j = 1, \dots, \dim V$  temos

$$A(|v_j\rangle) = \sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j}|w_k\rangle. \quad (20)$$

Seguindo,

$$(B \circ A)(|v_j\rangle) \equiv B(A(|v_j\rangle)) = B\left(\sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j}|w_k\rangle\right) \quad (21)$$

$$= \sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j}B(|w_k\rangle) = \sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j} \sum_{l=1}^{\dim X} B_{l,k}|x_l\rangle \quad (22)$$

$$= \sum_{l=1}^{\dim X} \left( \sum_{k=1}^{\dim W} B_{l,k}A_{k,j} \right) |x_l\rangle =: \sum_{l=1}^{\dim X} C_{l,j}|x_l\rangle \quad (23)$$

$$=: C(|v_j\rangle). \quad (24)$$

**Exercício:** Forneça a representação matricial para  $C = B \circ A$ , com  $A$  e  $B$  os operadores definidos no último exemplo e exercício, respectivamente.

## 1.1 Autovalores e autovetores

Se a ação de um operador linear  $A : V \rightarrow V$  não muda a "direção" de um vetor  $|a\rangle \in V$ , i.e., se

$$A|a\rangle \propto |a\rangle =: \alpha|a\rangle, \quad (25)$$

dizemos que  $|a\rangle$  é um autovetor de  $A$  e  $\alpha$  é o autovalor  $A$  correspondente ao autovetor  $|a\rangle$ . Note que  $\alpha$  nos indica quanto o tamanho do autovetor muda e se esse muda ou não de sentido sob a ação de  $A$ .

**Exercício:** Verifique que  $\|\alpha|a\rangle\| = |\alpha|\|a\|$ .

**Exemplo** Considere o operador definido por  $A(|e_1\rangle) = |e_2\rangle$  e  $A(|e_2\rangle) = |e_1\rangle$ . Notamos que para  $|a_{\pm}\rangle = |e_1\rangle \pm |e_2\rangle$  teremos

$$A|a_{\pm}\rangle = A(|e_1\rangle \pm |e_2\rangle) = A|e_1\rangle \pm A|e_2\rangle \quad (26)$$

$$= |e_2\rangle \pm |e_1\rangle = \pm(|e_1\rangle \pm |e_2\rangle) \quad (27)$$

$$= (\pm 1)|a_{\pm}\rangle = \alpha_{\pm}|a_{\pm}\rangle. \quad (28)$$

### 1.1.1 Equação característica

Vamos reescrever a equação de autovalores e autovetores acima usando a representação matricial do operador e dos autovetores numa mesma base:

$$A|a\rangle = \alpha\mathbb{I}|a\rangle, \quad (29)$$

$$\therefore (A - \alpha\mathbb{I})|a\rangle = |\emptyset\rangle. \quad (30)$$

Note que se  $A - \alpha\mathbb{I}$  possuir inversa, então  $|a\rangle = |\emptyset\rangle$ . Para não ter essa solução trivial devemos ter a chamada equação secular ou característica:

$$\det(A - \alpha\mathbb{I}) = 0. \quad (31)$$

Para um espaço vetorial de dimensão  $n$ , essa equação resulta em um polinômio de ordem  $n$ ,

$$c_n\alpha^n + c_{n-1}\alpha^{n-1} + \dots + c_2\alpha^2 + c_1\alpha + c_0 = 0, \quad (32)$$

que possui  $n$  raízes complexas, que são os autovalores de  $A$ .

### 1.1.2 Adjunto de um operador linear

Seja  $V$  um espaço de Hilbert. Então, por definição, para qualquer operador linear  $A : V \rightarrow V$  existe o operador adjunto a  $A$ , denotado por  $A^\dagger : V \rightarrow V$ , tal que

$$(|v\rangle, A|w\rangle) = (A^\dagger|v\rangle, |w\rangle), \forall |v\rangle, |w\rangle \in V. \quad (33)$$

Por conveniência, aqui usamos  $(|a\rangle, |b\rangle)$  para o produto interno de  $|a\rangle$  e  $|b\rangle$ .

Vamos verificar que a representação matricial de  $A^\dagger$  é dada pela transposta conjugada da representação matricial de  $A$ . Para isso vamos considerar uma base ortonormal  $\{|b_j\rangle\}_{j=1}^{\dim V} \in V$  e escrever  $|v\rangle = \sum_{j=1}^{\dim V} v_j|b_j\rangle$  e  $|w\rangle = \sum_{j=1}^{\dim V} w_j|b_j\rangle$ . Assim

$$(|v\rangle, A|w\rangle) = \left( \sum_{j=1}^{\dim V} v_j |b_j\rangle, A \sum_{k=1}^{\dim V} w_k |b_k\rangle \right) \quad (34)$$

$$= \left( \sum_{j=1}^{\dim V} v_j |b_j\rangle, \sum_{k=1}^{\dim V} w_k A|b_k\rangle \right) \quad (35)$$

$$= \sum_{j,k=1}^{\dim V} v_j^* w_k (|b_j\rangle, \sum_{l=1}^{\dim V} A_{l,k} |b_l\rangle) \quad (36)$$

$$= \sum_{j,k,l=1}^{\dim V} v_j^* w_k A_{l,k} (|b_j\rangle, |b_l\rangle) \quad (37)$$

$$= \sum_{j,k,l=1}^{\dim V} v_j^* w_k A_{l,k} \delta_{j,l} \quad (38)$$

$$= \sum_{j,k=1}^{\dim V} v_j^* w_k A_{j,k} \quad (39)$$

e

$$(A^\dagger |v\rangle, |w\rangle) = (A^\dagger \sum_{j=1}^{\dim V} v_j |b_j\rangle, \sum_{k=1}^{\dim V} w_k |b_k\rangle) \quad (40)$$

$$= \left( \sum_{j=1}^{\dim V} v_j A^\dagger |b_j\rangle, \sum_{k=1}^{\dim V} w_k |b_k\rangle \right) \quad (41)$$

$$= \sum_{j,k=1}^{\dim V} v_j^* w_k \left( \sum_{l=1}^{\dim V} (A^\dagger)_{l,j} |b_l\rangle, |b_k\rangle \right) \quad (42)$$

$$= \sum_{j,k,l=1}^{\dim V} v_j^* w_k (A_{l,j}^\dagger)^* (|b_l\rangle, |b_k\rangle) \quad (43)$$

$$= \sum_{j,k,l=1}^{\dim V} v_j^* w_k (A_{l,j}^\dagger)^* \delta_{l,k} \quad (44)$$

$$= \sum_{j,k=1}^{\dim V} v_j^* w_k (A_{k,j}^\dagger)^*. \quad (45)$$

Ou seja,

$$(|v\rangle, A|w\rangle) = (A^\dagger |v\rangle, |w\rangle) \Rightarrow (A^\dagger)_{j,k} = A_{k,j}^* \quad (46)$$

para a representação matricial desses operadores em uma base ortonormal.

OBS: Nas notas sobre determinantes, vocês verificaram que os autovalores de  $A^\dagger$  são iguais ao complexo conjugado dos autovalores de  $A$ . Vamos usar este resultado para verificar que  $A^\dagger$  e  $A$  compartilham autovetores. Para  $A|a\rangle = \alpha|a\rangle$  teremos

$$(A^\dagger |a\rangle, |a\rangle) = (|a\rangle, A|a\rangle) = (|a\rangle, \alpha|a\rangle) \quad (47)$$

$$= \alpha (|a\rangle, |a\rangle) = (\alpha^* |a\rangle, |a\rangle), \quad (48)$$

que nos mostra que  $A^\dagger|a\rangle = \alpha^*|a\rangle$ .

**Exercício:** Verique que  $(A^\dagger)^\dagger = A$ .

**Exercício:** Verifique que se  $\alpha$  é um escalar então  $(\alpha A)^\dagger = \alpha^* A^\dagger$ .

**Exercício:** Verifique que para  $A, B : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ , temos  $(A \circ B)^\dagger = B^\dagger \circ A^\dagger$ .

## 1.2 Projetores

Seja  $\{|w_j\rangle\}_{j=1}^{\dim W}$  uma base ortonormal de  $W$ . O projetor no subespaço  $W$  é um operador  $P_W : V \rightarrow W$  definido por

$$P_W(|v\rangle) := \sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|v\rangle |w_j\rangle, \quad (49)$$

com  $|v\rangle \in V$ .

*Exemplo:* Para  $\mathbb{C}^n$  temos  $\langle v|w\rangle = |v\rangle^\dagger |w\rangle$ . Nesse caso usamos

$$|v\rangle^\dagger = \langle v| \quad (50)$$

para qualquer vetor. Assim, teremos  $P_W(|v\rangle) = \sum_{j=1}^{\dim W} |w_j\rangle \langle w_j|^\dagger |v\rangle = (\sum_{j=1}^{\dim W} |w_j\rangle \langle w_j|) |v\rangle$ . Por conseguinte, para este espaço vetorial, teremos

$$P_W = \sum_{j=1}^{\dim W} |w_j\rangle \langle w_j|. \quad (51)$$

OBS:  $P_W$  atua como  $\mathbb{I}_W$  nos vetores de  $W$ . Consideremos um vetor qualquer  $|w\rangle \in W$  decomposto na base ortonormal  $\{|w_j\rangle\}_{j=1}^{\dim W}$  como (veja as notas sobre vetores):  $|w\rangle = \sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|w\rangle |w_j\rangle$ . É fácil ver assim que

$$P_W(|w\rangle) := \sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|w\rangle |w_j\rangle \quad (52)$$

$$= |w\rangle = \mathbb{I}_W(|w\rangle). \quad (53)$$

Sempre que  $P_W = \mathbb{I}_W$  dizemos que a base usada para definir o projetor é uma *base completa*.

*Verificação:*  $P_W : V \rightarrow W$ . Consideremos uma base ortonormal para o espaço vetorial  $V \supseteq W$ :  $\{|w_j\rangle\}_{j=1}^{\dim W}, \{|w_k^\perp\rangle\}_{k=\dim W+1}^{\dim V}$ . Assim, para um vetor qualquer  $|v\rangle \in V$  teremos

$$|v\rangle = \sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|v\rangle |w_j\rangle + \sum_{k=\dim W+1}^{\dim V} \langle w_k^\perp|v\rangle |w_k^\perp\rangle. \quad (54)$$

Então

$$P_W(|v\rangle) = \sum_{l=1}^{\dim W} \langle w_l|v\rangle |w_l\rangle \quad (55)$$

$$= \sum_{l=1}^{\dim W} \sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|v\rangle \langle w_l|w_j\rangle |w_l\rangle + \sum_{l=1}^{\dim W} \sum_{k=\dim W+1}^{\dim V} \langle w_k^\perp|v\rangle \langle w_l|w_k^\perp\rangle |w_l\rangle \quad (56)$$

$$= \sum_{l=1}^{\dim W} \sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|v\rangle \delta_{l,j} |w_l\rangle + \sum_{l=1}^{\dim W} \sum_{k=\dim W+1}^{\dim V} \langle w_k^\perp|v\rangle 0 |w_l\rangle \quad (57)$$

$$= \sum_{l=1}^{\dim W} \langle w_l|v\rangle |w_l\rangle \in W. \quad (58)$$

**Exercício:** Verifique que  $P_W \circ P_W = P_W$ . **Exercício:** Verifique que um projetor possui somente dois autovalores, 0 ou 1. Discorra sobre quais são os "autovetores" correspondentes. **Exercício:** Verifique que se  $P_W(|v\rangle) = \sum_{l=1}^{\dim W} \langle w_l|v\rangle |w_l\rangle$  e  $P_X(|v\rangle) = \sum_{l=1}^{\dim X} \langle x_l|v\rangle |x_l\rangle$  com  $\langle x_j|w_k\rangle = 0 \forall j, k$ , então

$$P_W \circ P_X = P_X \circ P_W = . \quad (59)$$

**Adjunto de projetores** Vamos verificar que o operador adjunto de um projetor é ele mesmo. considera  $\forall |a\rangle, |b\rangle \in \mathcal{H}$

$$(|a\rangle, P_W(|b\rangle)) = (|a\rangle, \sum_j \langle w_j|b\rangle |w_j\rangle) \quad (60)$$

$$= \sum_j \langle w_j|b\rangle (|a\rangle, |w_j\rangle) = \sum_j \langle w_j|b\rangle \langle w_j|a\rangle^* \quad (61)$$

$$= \sum_j \langle w_j|a\rangle^* (|w_j\rangle, |b\rangle) = (\sum_j \langle w_j|a\rangle |w_j\rangle, |b\rangle) \quad (62)$$

$$= (P_W^\dagger |a\rangle, |b\rangle), \quad (63)$$

ou seja,

$$P_W^\dagger(|a\rangle) = \sum_j \langle w_j|a\rangle |w_j\rangle = P_W(|a\rangle). \quad (64)$$

**Exercício:** Verifique esse propriedade explicitamente considerando os projetores de  $\mathbb{C}^n$ .

**Complemento ortonormal** O complemento ortonormal de um projetor  $P_W$  no subespaço  $W \subseteq V$  é definido como o projetor  $P_{W^\perp}$  tal que

$$P_W + P_{W^\perp} = \mathbb{I}_V. \quad (65)$$

Para esses projetores, teremos

$$P_W \circ P_{W^\perp}(|v\rangle) = P_W \circ (\mathbb{I}_V - P_W)(|v\rangle) \quad (66)$$

$$= P_W \circ \mathbb{I}_V(|v\rangle) - P_W \circ P_W(|v\rangle) \quad (67)$$

$$= P_W(|v\rangle) - P_W(|v\rangle) \quad (68)$$

$$= 0. \quad (69)$$

**Exercício:** Para  $\mathbb{C}^3$ , considere o projetor  $P_1 = |1\rangle\langle 1|$  com  $|1\rangle = [1 \ 0 \ 0]^T$ . Forneça dois complementos ortonormais para  $P_1$ ?

### 1.3 Operadores normais

Um operador  $A$  definido no espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  é dito normal se

$$A \circ A^\dagger = A^\dagger \circ A. \quad (70)$$

#### 1.3.1 Teorema (decomposição espectral)

Existe uma base ortonormal de  $\mathcal{H}$  constituída por autovetores do operador linear  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  se e somente se ele for normal.

**Prova** Vamos começar assumindo a existência de uma base ortonormal  $\{|a\rangle\}$  de autovetores de  $A$ , i.e.,  $A|a\rangle := a|a\rangle$  (note que aqui usamos  $a$  também para os autovalores). Consideremos o projetor unidimensional aplicado a um vetor qualquer  $|v\rangle \in \mathcal{H}$ :

$$P_a(|v\rangle) = \langle a|v\rangle|a\rangle. \quad (71)$$

Ademais, podemos escrever  $|v\rangle = \sum_a \langle a|v\rangle|a\rangle$ . Assim

$$A(|v\rangle) = A\left(\sum_a \langle a|v\rangle|a\rangle\right) = \sum_a \langle a|v\rangle A(|a\rangle) \quad (72)$$

$$= \sum_a \langle a|v\rangle a(|a\rangle) = \sum_a a \langle a|v\rangle (|a\rangle) \quad (73)$$

$$= \sum_a a P_a(|v\rangle). \quad (74)$$

Essa é a chamada *decomposição espectral*:

$$A = \sum_a a P_a. \quad (75)$$

Notemos que como  $\forall |v\rangle \in \mathcal{H}$  podemos escrever  $|v\rangle = \sum_a \langle a|v\rangle|a\rangle$ , teremos que

$$\left(\sum_a P_a\right)(|v\rangle) = \sum_a P_a(|v\rangle) = \sum_a \langle a|v\rangle|a\rangle \quad (76)$$

$$= |v\rangle = \mathbb{I}_{\mathcal{H}}|v\rangle. \quad (77)$$

Portanto, nesse caso,

$$\sum_a P_a = \mathbb{I}_{\mathcal{H}}. \quad (78)$$

**Exercício:** Verifique que a decomposição espectral para o adjunto de  $A = \sum_a a P_a$  é  $A^\dagger = \sum_a a^* P_a$ .

Com isso podemos escrever



$$A \circ A^\dagger(|v\rangle) = \left(\sum_a a P_a\right) \circ \left(\sum_{a'} a'^* P_{a'}\right)(|v\rangle) \quad (79)$$

$$= \left(\sum_a a P_a\right) \circ \left(\sum_{a'} a'^* P_{a'}(|v\rangle)\right) \quad (80)$$

$$= \sum_{a,a'} a a'^* P_a(P_{a'}(|v\rangle)) \quad (81)$$

$$= \sum_{a,a'} a a'^* (P_a \circ P_{a'})(|v\rangle) \quad (82)$$

$$= \sum_{a,a'} a a'^* (\delta_{a,a'} P_a)(|v\rangle) \quad (83)$$

$$= \sum_a |a|^2 P_a(|v\rangle). \quad (84)$$

E

$$A^\dagger \circ A(|v\rangle) = \left(\sum_a a^* P_a\right) \circ \left(\sum_{a'} a' P_{a'}\right)(|v\rangle) \quad (85)$$

$$= \left(\sum_a a^* P_a\right) \circ \left(\sum_{a'} a' P_{a'}(|v\rangle)\right) \quad (86)$$

$$= \sum_{a,a'} a^* a' P_a(P_{a'}(|v\rangle)) \quad (87)$$

$$= \sum_{a,a'} a^* a' (P_a \circ P_{a'})(|v\rangle) \quad (88)$$

$$= \sum_{a,a'} a^* a' (\delta_{a,a'} P_a)(|v\rangle) \quad (89)$$

$$= \sum_a |a|^2 P_a(|v\rangle). \quad (90)$$

Por conseguinte,

$$\exists\{|a\rangle\} \mid A = \sum_a a P_a \text{ with } P_a P_{a'} = \delta_{a,a'} P_a \text{ e } \sum_a P_a = \mathbb{I}_{\mathcal{H}} \Rightarrow A \circ A^\dagger = A^\dagger \circ A. \quad (91)$$

Passemos para a segunda parte da prova, onde assumimos que  $A$  é normal e mostramos que existe uma base ortonormal que o diagonaliza. Começamos considerando o autovalor  $a$  de  $A$  e o projetor  $P_a$  no subespaço  $\mathcal{H}_a$  de  $\mathcal{H}$  gerado pelos autovetores de  $A$  correspondentes ao autovalor  $a$ . Seja  $P_{a^\perp}$  o complemento ortonormal de  $P_a$ . Segue assim que

$$A = \mathbb{I}_{\mathcal{H}} \circ A \circ \mathbb{I}_{\mathcal{H}} \quad (92)$$

$$= (P_a + P_{a^\perp}) \circ A \circ (P_a + P_{a^\perp}) \quad (93)$$

$$= P_a \circ A \circ P_a + P_a \circ A \circ P_{a^\perp} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_a + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}. \quad (94)$$

Agora,  $\forall |v\rangle \in \mathcal{H}$ ,

$$(A \circ P_a)(|v\rangle) = A(P_a(|v\rangle)) = A\left(\sum_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_a} \langle a_j|v\rangle |a_j\rangle\right) \quad (95)$$

$$= \sum_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_a} \langle a_j|v\rangle A(|a_j\rangle) = \sum_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_a} \langle a_j|v\rangle a |a_j\rangle \quad (96)$$

$$= a \sum_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_a} \langle a_j|v\rangle |a_j\rangle \quad (97)$$

$$= a P_a(|v\rangle). \quad (98)$$

**Exercício:** Verifique que  $A^\dagger \circ P_a = a^* P_a$ .

Assim

$$P_a \circ A \circ P_a = P_a \circ a P_a = a P_a \circ P_a = a P_a, \quad (99)$$

$$P_{a^\perp} \circ A \circ P_a = P_{a^\perp} \circ a P_a = a P_{a^\perp} \circ P_a = \mathcal{H}. \quad (100)$$

Com isso teremos que

$$(P_a \circ A \circ P_{a^\perp})^\dagger = P_{a^\perp}^\dagger \circ A^\dagger \circ P_a^\dagger \quad (101)$$

$$= P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ P_a = P_{a^\perp} \circ a^* P_a \quad (102)$$

$$= a^* P_{a^\perp} \circ P_a = a^* \mathcal{H} \quad (103)$$

$$= \mathcal{H}. \quad (104)$$

Juntando esses resultados obtemos

$$A = a P_a + \mathcal{H} + \mathcal{H} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp} \quad (105)$$

$$= a P_a + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}. \quad (106)$$

Seguindo, verifiquemos que o operador  $\tilde{A} := P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}$  também é normal se  $A$  é normal

$$(P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp})^\dagger \circ (P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) \quad (107)$$

$$= P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} \circ P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp} = P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp} \quad (108)$$

$$= P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ (\mathcal{H} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) = P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ (P_a \circ A \circ P_{a^\perp} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) \quad (109)$$

$$= P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ ((P_a + P_{a^\perp}) \circ A \circ P_{a^\perp}) \quad (110)$$

$$= P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ (\mathbb{I}_{\mathcal{H}} \circ A \circ P_{a^\perp}) \quad (111)$$

$$= P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ A \circ P_{a^\perp} \quad (112)$$

$$= P_{a^\perp} \circ A \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} \quad (113)$$

$$= P_{a^\perp} \circ A \circ \mathbb{I}_{\mathcal{H}} \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} = P_{a^\perp} \circ A \circ (P_a + P_{a^\perp}) \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} \quad (114)$$

$$= (P_{a^\perp} \circ A \circ P_a + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} = (\mathcal{H} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} \quad (115)$$

$$= (P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp})(P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp}). \quad (116)$$

Assim, se repetimos o procedimento feito inicialmente para  $A$  no caso de  $\tilde{A}$  teremos

$$A = aP_a + \tilde{a}P_{\tilde{a}} + P_{\tilde{a}^\perp} \circ \tilde{A} \circ P_{\tilde{a}^\perp}, \quad (117)$$

com  $P_{\tilde{a}^\perp} \circ \tilde{A} \circ P_{\tilde{a}^\perp}$  sendo também um operador normal. Então, se repetimos esse processo até completarmos o espaço, i.e., até que  $\sum_a P_a = \mathbb{I}_{\mathcal{H}}$ , teremos obtido a decomposição espectral de  $A$ . Com isso completamos a prova do teorema

$$A \circ A^\dagger = A^\dagger \circ A \Rightarrow \exists \{P_a\} \mid \sum_a P_a = \mathbb{I}_{\mathcal{H}} \text{ e } A = \sum_a aP_a. \quad (118)$$

## 1.4 Operadores Hermitianos

Esses são os operadores usados em Mecânica Quântica para descrever quantidades observáveis experimentalmente. Um operador linear  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  é dito Hermitiano se seu adjunto for ele próprio, i.e.,

$$A^\dagger = A. \quad (119)$$

*OBS:* Se um operador linear  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  é Hermitiano, ele também é normal e possui uma decomposição espectral. Então, se  $A|a\rangle = a|a\rangle$  e  $A|a'\rangle = a'|a'\rangle$  com  $a \neq a'$ , devemos ter  $\langle a|a\rangle = 0$ , i.e., os autovetores correspondentes são ortogonais.

### 1.4.1 Teorema

Operadores Hermitianos possuem autovalores reais e seus autovetores correspondentes a autovalores diferentes são ortogonais.

**Prova** Considera um par qualquer de autovalores de  $A$ , i.e., considera  $A|a\rangle = a|a\rangle$  e  $A|a'\rangle = a'|a'\rangle$ . Temos assim que

$$(|a'\rangle, A|a\rangle) = (|a'\rangle, a|a\rangle) = a(|a'\rangle, |a\rangle) \quad (120)$$

$$(A^\dagger|a'\rangle, |a\rangle) = (A|a'\rangle, |a\rangle) = (a'|a'\rangle, |a\rangle) \quad (121)$$

$$= a'^*(|a'\rangle, |a\rangle). \quad (122)$$

Portanto

$$(a - a'^*)\langle a'|a\rangle = 0. \quad (123)$$

Vemos assim que se  $a = a'$ ,  $\langle a|a\rangle \neq 0$  e devemos ter  $a - a^* = 0 \Rightarrow \Im(a) = 0 \Rightarrow a \in \mathbb{R}$ .

**Exercício:** Operadores *anti-Hermitianos* são definidos por  $A^\dagger = -A$ . Esses operadores possuem uma decomposição espectral? Se sim, prove que os autovalores desse tipo de operador não são números imaginários puros e que seus autovetores correspondentes a autovalores diferentes são ortogonais.

### 1.4.2 Comutador

O comutador entre dois operadores lineares  $A, B : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  é um operador em  $\mathcal{H}$  definido por

$$[A, B] := A \circ B - B \circ A. \quad (124)$$

A importância desse operador é que se  $[A, B] = 0$ , então a ordem com que esses operadores são aplicados não faz diferença. Caso contrário, obteremos diferentes vetores mudando a ordem de aplicação dos operadores.

Vemos assim que poderíamos ter definido *operadores normais* como sendo aqueles operadores que comutam com seu adjunto:

$$[A, A^\dagger] = 0. \quad (125)$$

**Exercício:** Verifique que para  $X, Y, Z : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  temos

$$[X, Y + Z] = [X, Y] + [X, Z], \quad (126)$$

$$[X + Y, Z] = [X, Z] + [Y, Z], \quad (127)$$

$$[X, Y \circ Z] = Y \circ [X, Z] + [X, Y] \circ Z, \quad (128)$$

$$[X \circ Y, Z] = X \circ [Y, Z] + [X, Z] \circ Y. \quad (129)$$

As matrizes de Pauli são definidas por:

$$\sigma_x \equiv \sigma_1 := \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_y \equiv \sigma_2 := \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_z \equiv \sigma_3 := \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (130)$$

**Exercício:** Verifique que para as matrizes de Pauli teremos

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{j,k} \sigma_0 + \text{sgn}(j, k, l) i \sigma_l. \quad (131)$$

**Exercício:** verifique que as matrizes de Pauli satisfazem a relação de comutação a seguir:

$$[\sigma_j, \sigma_k] = \text{sgn}(j, k, l) 2i \sigma_l. \quad (132)$$

O *anti-comutador* entre dois operadores lineares  $A, B : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  é o operador linear definido como

$$\{A, B\} := A \circ B + B \circ A. \quad (133)$$

**Exercício:** Verifique que as matrizes de Pauli anti-comutam:

$$\{\sigma_j, \sigma_k\} := 0. \quad (134)$$

```
In [14]: def comm(A,B):
         return A*B-B*A
```

```
In [5]: def pauli(j):
         if j == 1:
             return Matrix([[0,1],[1,0]])
         if j == 2:
             return Matrix([[0,-1j],[1j,0]])
```

```

if j == 3:
    return Matrix([[1,0],[0,-1]])
#pauli(3)
#comm(pauli(1),pauli(2))
pauli(2)*pauli(3)

```

Out [5]:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1.0i \\ 1.0i & 0 \end{bmatrix}$$

## 1.5 Teorema (diagonalização simultânea)

Dois operadores lineares Hermitianos  $A, B : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  compartilham a mesma base de autovetores se e somente se comutarem, i.e.,

$$A = \sum_j a_j P_j \text{ e } B = \sum_j b_j P_j \Leftrightarrow [A, B] = \mathcal{H}. \quad (135)$$

### 1.5.1 Prova

Começamos assumindo que  $A$  e  $B$  são diagonalizados na mesma base ortonormal. Assim

$$[A, B] = \left[ \sum_j a_j P_j, \sum_k b_k P_k \right] = \sum_{j,k} a_j b_k [P_j, P_k] \quad (136)$$

$$= \sum_{j,k} a_j b_k (P_j \circ P_k - P_k \circ P_j) = \sum_{j,k} a_j b_k (\delta_{j,k} P_j - \delta_{k,j} P_k) \quad (137)$$

$$= \mathcal{H}. \quad (138)$$

Seguindo, assumimos que  $A \circ B = B \circ A$ . Assim, considerando a decomposição espectral  $A = \sum_j a_j P_j$ , teremos

$$A \circ (B \circ P_j) = (A \circ B) \circ P_j = (B \circ A) \circ P_j = B \circ (A \circ P_j) \quad (139)$$

$$= B \circ (a_j P_j) = a_j (B \circ P_j). \quad (140)$$

Para que essa relação seja verdadeira,  $B$  deve levar vetores do subespaço gerado pelos autovetores de  $A$  correspondentes ao autovalor  $a_j$  em vetores desse mesmo subespaço. Mas se isso ocorre, como  $B$  é Hermitiano, deve existir uma base ortonormal desse subespaço que é constituída por autovetores de  $B$ . E isso implica que existe uma base comum de autovetores de  $A$  e  $B$ , completando assim a prova do teorema.

Uma maneira mais fácil de entender esta última parte da prova é a seguinte. Considera a eq. de autovalores  $A|a_j^{(k)}\rangle = a_j|a_j^{(k)}\rangle$  com  $k = 1, \dots, \dim \mathcal{H}_j$ . Note que  $\mathcal{H}_j \subseteq \mathcal{H}$  é o subespaço gerado pelo autovetores de  $A$  correspondentes ao autovalor  $a_j$ . Agora,

$$A(B|a_j^{(k)}\rangle) = (A \circ B)(|a_j^{(k)}\rangle) = (B \circ A)(|a_j^{(k)}\rangle) \quad (141)$$

$$= B(A(|a_j^{(k)}\rangle)) = B(a_j(|a_j^{(k)}\rangle)) \quad (142)$$

$$= a_j(B|a_j^{(k)}\rangle). \quad (143)$$

Ou seja  $B|a_j^{(k)}\rangle$  também é autovetor de  $A$  com autovalor  $a_j$ . Portanto  $B|a_j^{(k)}\rangle \in \mathcal{H}_j$ . Como  $B$  é Hermitiano, existe uma base de  $\mathcal{H}_j$  que o diagonaliza, e que também diagonaliza  $A$ .

**Exercício:** Determine de  $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$  e  $\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$  compartilham ou não a mesma base de autovetores. Obtenha essas bases.

## 1.6 Operadores unitários

São utilizados para descrever a dinâmica de sistemas quânticos. Um operador (ou matriz)  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  é dito unitário se

$$A^\dagger \circ A = A \circ A^\dagger = \mathbb{I}_{\mathcal{H}}, \quad (144)$$

ou seja, o adjunto de um operador unitário é igual a sua inversa:  $A^\dagger = A^{-1}$ .

**Exercício:** Verifique que  $\det(A) = \pm 1$  se  $A$  for uma matriz unitária.

Algumas outras propriedades importantes de operadores unitários são as seguintes: 1. Operadores unitários preservam o produto interno. Ou seja, para  $\forall |v\rangle, |w\rangle \in \mathcal{H}$  teremos

$$(A|v\rangle, A|w\rangle) = (A^\dagger \circ A|v\rangle, |w\rangle) = (\mathbb{I}_{\mathcal{H}}|v\rangle, |w\rangle) \quad (145)$$

$$= (|v\rangle, |w\rangle). \quad (146)$$

2. Os autovalores de um operador unitário são números complexos com módulo igual a 1: Considera  $A|a\rangle = a|a\rangle$ . Teremos

$$(A|a\rangle, A|a\rangle) = (a|a\rangle, a|a\rangle) = a^*a(|a\rangle, |a\rangle) = |a|^2 \langle a|a\rangle \quad (147)$$

$$(A^\dagger \circ A|a\rangle, |a\rangle) = (\mathbb{I}_{\mathcal{H}}|a\rangle, |a\rangle) = \langle a|a\rangle. \quad (148)$$

Portando  $|a| = 1$  e os autovalores da matriz unitária devem ter a forma  $a = e^{i\theta_a}$ . **Exercício:** Verifique que a matriz  $\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$  é unitária, calcule seus autovalores e os coloque na forma polar.

3. O conjunto de vetores linha de uma matriz unitária  $A \in \mathbb{C}^{d \times d}$  é um conjunto ortonormal:

$$\langle L_j^A | L_k^A \rangle = |L_j^A\rangle^\dagger |L_k^A\rangle = \begin{bmatrix} A_{j,1}^* & A_{j,2}^* & \cdots & A_{j,d}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{k,1} \\ A_{k,2} \\ \vdots \\ A_{k,d} \end{bmatrix} \quad (149)$$

$$= A_{j,1}^* A_{k,1} + A_{j,2}^* A_{k,2} + \cdots + A_{j,d}^* A_{k,d} = \sum_{l=1}^d A_{k,l} (A^\dagger)_{l,j} \quad (150)$$

$$= (AA^\dagger)_{k,j} = (\mathbb{I}_d)_{k,j} \quad (151)$$

$$= \delta_{k,j}. \quad (152)$$

**Exercício:** Faça a verificação análoga para o conjunto de vetores coluna de uma matriz unitária.