03_operators

September 3, 2019

Notas de aula: Mecânica Quântica, Autor: Jonas Maziero, Departamento de Física, UFSM

```
In [3]: %run init.ipynb
```

1 Operadores lineares

Um *operador linear* é qualquer função $A : V \to W$ (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

$$A(\sum_j c_j|v_j\rangle) = \sum_j c_j A(|v_j\rangle). \tag{1}$$

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

$$(A + B)(|v\rangle) = A(|v\rangle) + B(|v\rangle). \tag{2}$$

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

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

e o operador nulo, definido por

$$_V|v\rangle = |\oslash\rangle, \forall|v\rangle \in V. \tag{4}$$

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

$$A(|v\rangle) = A(\sum_j c_j|w_j\rangle) = \sum_j c_j A(|w_j\rangle). \tag{5}$$

1.0.1 Matrizes são operadores lineares

Considere matrizes retangulares $A \in \mathbb{C}^{mxn}$. Não é difícil ver que para $|v\rangle \in \mathbb{C}^n$ e $|v'\rangle \in \mathbb{C}^m$ teremos verifica $(A+B)|w\rangle = A|w\rangle + B|W\rangle$

$$\begin{bmatrix} |v'\rangle_1 \\ |v'\rangle_2 \\ \vdots \\ |v'\rangle_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & \cdots & A_{1,n} \\ A_{2,1} & A_{2,2} & \cdots & A_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{m,1} & A_{m,2} & \cdots & A_{m,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |v\rangle_1 \\ |v\rangle_2 \\ \vdots \\ |v\rangle_n \end{bmatrix} \Rightarrow |v'\rangle_j = \sum_{k=1}^{n} A_{j,k}|v\rangle_k \text{ para } j = 1, \cdots, m \tag{6}$$

ou, equivalentemente, $|v'\rangle = A|v\rangle$. (7)

Ou seja, $A : \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^m$. 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

$$(A|w\rangle)_k = \left(A\sum_j c_j|w_j\rangle\right)_k = \sum_l A_{k,l}|w\rangle_l = \sum_l A_{k,l}\sum_j c_j|w_j\rangle_l = \sum_j c_j \sum_l A_{k,l}|w_j\rangle_l = \sum_j c_j(A|w_j\rangle)_k, \tag{8}$$

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,

$$\mathbb{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \text{ e } = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}. \tag{9}$$

1.0.2 Representação matricial de operadores lineares

Consideremos $A : V \to W$ 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 $j = 1, \cdots, \dim V$, podemos escrever

$$A(|v_j\rangle) = \sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j}|w_k\rangle, \tag{10}$$

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

$$A \doteq \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & \cdots & A_{1,\dim V} \\ A_{2,1} & A_{2,2} & \cdots & A_{2,\dim V} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{\dim W,1} & A_{\dim W,2} & \cdots & A_{\dim W,\dim V} \end{bmatrix}. \tag{11}$$

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:

$$|w\rangle \doteq \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{\dim W} \end{bmatrix}. \tag{12}$$

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

$$A(|e_1\rangle) := |e_2\rangle \text{ e } A(|e_2\rangle) := |e_1\rangle. \tag{13}$$

Teremos assim que

$$A(|e_1\rangle) = \sum_{k=1}^{2} A_{k,1}|e_k\rangle = A_{1,1}|e_1\rangle + A_{2,1}|e_2\rangle \text{ e } A(|e_2\rangle) = \sum_{k=1}^{2} A_{k,2}|e_k\rangle = A_{1,2}|e_1\rangle + A_{2,2}|e_k\rangle. \tag{14}$$

Então, comparando a definição com estas últimas relações teremos

$$A \doteq \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} \\ A_{2,1} & A_{2,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \tag{15}$$

Exercício: Considere a base $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$ e $B: V \to V$ 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.

Exercício: Forneça a representação matricial dos vetores da base $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$ na base base $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$.

1.0.3 Composição de operadores lineares

Consideremos operadores lineares $A : V \to W$ e $B : W \to X$ 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 $C : V \to X$, cuja representação matricial pode ser obtida daquelas de A e de B. Explicitando, para $j = 1, \cdots, \dim V$ temos

$$A(|v_j\rangle) = \sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j}|w_k\rangle. \tag{16}$$

Seguindo,

$$(B \circ A)(|v_j\rangle) \equiv B(A(|v_j\rangle)) = B(\sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j}|w_k\rangle) = \sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j}B(|w_k\rangle) = \sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j} \sum_{l=1}^{\dim X} B_{l,k}|x_l\rangle \tag{17}$$

$$= \sum_{l=1}^{\dim X} \left(\sum_{k=1}^{\dim W} B_{l,k}A_{k,j} \right) |x_l\rangle =: \sum_{l=1}^{\dim X} C_{l,j}|x_l\rangle =: C(|v_j\rangle). \tag{18}$$

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 $A : V \to V$ não muda a "direção" de um vetor $|a\rangle \in V$, i.e., se

$$A|a\rangle \propto |a\rangle =: \alpha|a\rangle, \tag{19}$$

dizemos que $|a\rangle$ é um autovetor de A e α é o autovalor A correpondente ao autovetor $|a\rangle$. Note que α 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

$$A|a_\pm\rangle = A(|e_1\rangle \pm |e_2\rangle) = A|e_1\rangle \pm A|e_2\rangle = |e_2\rangle \pm |e_1\rangle = \pm(|e_1\rangle \pm |e_2\rangle) = (\pm 1)|a_\pm\rangle = \alpha_\pm |a_\pm\rangle. \tag{20}$$

1.1.1 Equação característica

Vamos reescrever a equação de autovalores e autovetores acima da seguinte forma:

$$A|a\rangle = \alpha \mathbb{I}|a\rangle \quad \therefore (A - \alpha\mathbb{I})|a\rangle = |\oslash\rangle. \tag{21}$$

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

$$\det(A - \alpha\mathbb{I}) = \det \begin{bmatrix} A_{1,1} - \alpha & A_{1,2} & \cdots & A_{1,\dim V} \\ A_{2,1} & A_{2,2} - \alpha & \cdots & A_{2,\dim V} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{\dim V,1} & A_{\dim V,2} & \cdots & A_{\dim V,\dim V} - \alpha \end{bmatrix} = 0. \tag{22}$$

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

$$c_n\alpha^n + c_{n-1}\alpha^{n-1} + \cdots + c_2\alpha^2 + c_1\alpha + c_0 = 0, \tag{23}$$

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

```
In [7]: a,b,c,d = symbols("a b c d")
        #A = Matrix([[a,b],[c,d]])
        A = Matrix([[0,-1j],[1j,0]])
        #A
        A.eigenvects()
        # Na lista abaixo aparecem (autovalor, multiplicidade, autovetor)
```

```
Out[7]:
```

$$\left[\left(-1.0, \quad 1, \quad \left[\begin{bmatrix} 1.0i \\ 1.0 \end{bmatrix}\right]\right), \quad \left(1.0, \quad 1, \quad \left[\begin{bmatrix} -1.0i \\ 1.0 \end{bmatrix}\right]\right)\right]$$

Exemplo: Vamos calcular os autovalores e autovetores da matriz $\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$. Para os autovalores:

$$\det(\sigma_y - \alpha\mathbb{I}_2) = \det \begin{bmatrix} -\alpha & 1 \\ 1 & -\alpha \end{bmatrix} = \alpha^2 - 1 = 0 \Rightarrow \alpha = \pm 1. \tag{24}$$

Para os autovetores, se $\alpha = 1$ teremos

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = (1) \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \Rightarrow b = a = 1 \Rightarrow |\alpha = 1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{25}$$

Para $\alpha = -1$ teremos

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = (-1) \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \Rightarrow b = -a = 1 \Rightarrow |\alpha = 1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}. \tag{26}$$

Exercício: Calcule os autovalores e autovetores da matriz $\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$.

1.1.2 Adjunto de um operador linear

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

$$(|v\rangle, A|w\rangle) = (A^\dagger|v\rangle, |w\rangle), \forall |v\rangle, |w\rangle \in V. \tag{27}$$

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

$$(|v\rangle, A|w\rangle) = (\sum_{j=1}^{\dim V} v_j|b_j\rangle, A\sum_{k=1}^{\dim V} w_k|b_k\rangle) = (\sum_{j=1}^{\dim V} v_j|b_j\rangle, \sum_{k=1}^{\dim V} w_k A|b_k\rangle) = \sum_{j,k=1}^{\dim V} v_j^* w_k(|b_j\rangle, \sum_{l=1}^{\dim V} A_{l,k}|b_l\rangle) \tag{28}$$

$$= \sum_{j,k,l=1}^{\dim V} v_j^* w_k A_{l,k}(|b_j\rangle, |b_l\rangle) = \sum_{j,k,l=1}^{\dim V} v_j^* w_k A_{l,k}\delta_{j,l} = \sum_{j,k=1}^{\dim V} v_j^* w_k A_{j,k} \tag{29}$$

e

$$(A^\dagger|v\rangle, |w\rangle) = (A^\dagger \sum_{j=1}^{\dim V} v_j|b_j\rangle, \sum_{k=1}^{\dim V} w_k|b_k\rangle) = (\sum_{j=1}^{\dim V} v_j A^\dagger|b_j\rangle, \sum_{k=1}^{\dim V} w_k|b_k\rangle) = \sum_{j,k=1}^{\dim V} v_j^* w_k(\sum_{l=1}^{\dim V}(A^\dagger)_{l,j}|b_l\rangle, |b_k\rangle) \tag{30}$$

$$= \sum_{j,k,l=1}^{\dim V} v_j^* w_k (A^\dagger_{l,j})^*(|b_l\rangle, |b_k\rangle) = \sum_{j,k,l=1}^{\dim V} v_j^* w_k (A^\dagger_{l,j})^* \delta_{l,k} = \sum_{j,k=1}^{\dim V} v_j^* w_k (A^\dagger_{k,j})^*. \tag{31}$$

Ou seja,

$$(|v\rangle, A|w\rangle) = (A^\dagger|v\rangle, |w\rangle) \Rightarrow (A^\dagger)_{j,k} = A^*_{k,j} \tag{32}$$

para a representação matricial desses operadores em uma base ortonormal.

OBS: Nas notas sobre determinantes, vocês verificaram que os autovelores 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

$$(A^\dagger|a\rangle, |a\rangle) = (|a\rangle, A|a\rangle) = (|a\rangle, \alpha|a\rangle) = \alpha(|a\rangle, |a\rangle) = (\alpha^*|a\rangle, |a\rangle), \tag{33}$$

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

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

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

Exercício: Verifique que para $A, B : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, 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 $P_W : V \to W$ definido por

$$P_W(|v\rangle) := \sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|v\rangle|w_j\rangle, \tag{34}$$

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

$$|v\rangle^\dagger = \langle v| \tag{35}$$

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

$$P_W = \sum_{j=1}^{\dim W} |w_j\rangle\langle w_j|. \tag{36}$$

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 facil ver assim que

$$P_W(|w\rangle) := \sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|v\rangle|w_j\rangle = |w\rangle = \mathbb{I}_W(|w\rangle). \tag{37}$$

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

$$|v\rangle = \sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|v\rangle|w_j\rangle + \sum_{k=\dim W+1}^{\dim V} \langle w_k^\perp|v\rangle|w_k^\perp\rangle. \tag{38}$$

Então

$$P_W(|v\rangle) = \sum_{l=1}^{\dim W} \langle w_l|v\rangle|w_l\rangle = \sum_{l=1}^{\dim W}\sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|v\rangle\langle w_l|w_j\rangle|w_l\rangle + \sum_{l=1}^{\dim W}\sum_{k=\dim W+1}^{\dim V} \langle w_k^\perp|v\rangle\langle w_l|w_k^\perp\rangle|w_l\rangle \tag{39}$$

$$= \sum_{l=1}^{\dim W}\sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|v\rangle\delta_{l,j}|w_l\rangle + \sum_{l=1}^{\dim W}\sum_{k=\dim W+1}^{\dim V} \langle w_k^\perp|v\rangle 0|w_l\rangle = \sum_{l=1}^{\dim W} \langle w_l|v\rangle|w_l\rangle \in W. \tag{40}$$

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

$$P_W \circ P_X = P_X \circ P_W = . \tag{41}$$

1.2.1 Adjunto de projetores

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

$$(P_W^\dagger |a\rangle, |b\rangle) = (|a\rangle, P_w(|b\rangle)) = (|a\rangle, \sum_j \langle w_j|b\rangle |w_j\rangle) = \sum_j \langle w_j|b\rangle (|a\rangle, |w_j\rangle) = \sum_j \langle w_j|b\rangle \langle w_j|a\rangle^* \tag{42}$$

$$= \sum_j \langle w_j|a\rangle^* (|w_j\rangle, |b\rangle) = (\sum_j \langle w_j|a\rangle |w_j\rangle, |b\rangle) = (P_W|a\rangle, |b\rangle). \tag{43}$$

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

1.2.2 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

$$P_W + P_{W^\perp} = \mathbb{I}_V. \tag{44}$$

Para esses projetores, teremos

$$P_W \circ P_{W^\perp}(|v\rangle) = P_W \circ (\mathbb{I}_V - P_W)(|v\rangle) = P_W \circ \mathbb{I}_V(|v\rangle) - P_W \circ P_W(|v\rangle) = P_W(|v\rangle) - P_W(|v\rangle) = {}_V(|v\rangle). \tag{45}$$

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

2 Operadores normais

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

$$A \circ A^\dagger = A^\dagger \circ A. \tag{46}$$

2.1 Teorema (decomposição espectral)

Existe uma base ortonormal de $\mathcal{H}$ constituída por autovetores do operador linear $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ 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 $|v\rangle \in \mathcal{H}$:

$$P_a(|v\rangle) = \langle a|v\rangle |a\rangle. \tag{47}$$

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

$$A(|v\rangle) = A(\sum_a \langle a|v\rangle |a\rangle) = \sum_a \langle a|v\rangle A(|a\rangle) = \sum_a \langle a|v\rangle a(|a\rangle) = \sum_a a\langle a|v\rangle(|a\rangle) = \sum_a a P_a(|v\rangle). \tag{48}$$

Essa é a chamada *decomposição espectral*:

$$A = \sum_a a P_a. \tag{49}$$

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

$$(\sum_a P_a)(|v\rangle) = \sum_a P_a(|v\rangle) = \sum_a \langle a|v\rangle |a\rangle = |v\rangle = \mathbb{I}_{\mathcal{H}}|v\rangle. \tag{50}$$

Portanto, nesse caso,

$$\sum_a P_a = \mathbb{I}_{\mathcal{H}}. \tag{51}$$

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

$$A \circ A^\dagger(|v\rangle) = (\sum_a a P_a) \circ (\sum_{a'} a'^* P_{a'})(|v\rangle) = (\sum_a a P_a) \circ (\sum_{a'} a'^* P_{a'}(|v\rangle)) = \sum_{a,a'} a a'^* P_a(P_{a'}(|v\rangle)) \tag{52}$$

$$= \sum_{a,a'} a a'^* (P_a \circ P_{a'})(|v\rangle) = \sum_{a,a'} a a'^* (\delta_{a,a'} P_a)(|v\rangle) = \sum_a |a|^2 P_a(|v\rangle). \tag{53}$$

E

$$A^\dagger \circ A(|v\rangle) = (\sum_a a^* P_a) \circ (\sum_{a'} a' P_{a'})(|v\rangle) = (\sum_a a^* P_a) \circ (\sum_{a'} a' P_{a'}(|v\rangle)) = \sum_{a,a'} a^* a' P_a(P_{a'}(|v\rangle)) \tag{54}$$

$$= \sum_{a,a'} a^* a' (P_a \circ P_{a'})(|v\rangle) = \sum_{a,a'} a^* a' (\delta_{a,a'} P_a)(|v\rangle) = \sum_a |a|^2 P_a(|v\rangle). \tag{55}$$

Por conseguinte,

$$\exists \{|a\rangle\} \mid A = \sum_a a P_a \text{ with } P_a P_{a'} = \delta_{a,a'} P_a \text{ e } \sum_a P_a = \mathbb{I}_{\mathcal{H}} \Rightarrow A \circ A^\dagger = A^\dagger \circ A. \tag{56}$$

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

$$A = \mathbb{I}_{\mathcal{H}} \circ A \circ \mathbb{I}_{\mathcal{H}} = (P_a + P_{a^\perp}) \circ A \circ (P_a + P_{a^\perp}) \tag{57}$$

$$= P_a \circ A \circ P_a + P_a \circ A \circ P_{a^\perp} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_a + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}. \tag{58}$$

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

$$(A \circ P_a)(|v\rangle) = A(P_a(|v\rangle)) = A\left(\sum_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_a} \langle a_j|v\rangle |a_j\rangle\right) = \sum_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_a} \langle a_j|v\rangle A(|a_j\rangle) = \sum_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_a} \langle a_j|v\rangle a |a_j\rangle = a \sum_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_a} \langle a_j|v\rangle |a_j\rangle \tag{59}$$

$$= a P_a(|v\rangle). \tag{60}$$

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

$$P_a \circ A \circ P_a = P_a \circ a P_a = a P_a \circ P_a = a P_a, \tag{61}$$
$$P_{a^\perp} \circ A \circ P_a = P_{a^\perp} \circ a P_a = a P_{a^\perp} \circ P_a = {}_{\mathcal{H}}. \tag{62}$$

Com isso teremos que

$$(P_a \circ A \circ P_{a^\perp})^\dagger = P_{a^\perp}^\dagger \circ A^\dagger \circ P_a^\dagger = P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ P_a = P_{a^\perp} \circ a^* P_a = a^* P_{a^\perp} \circ P_a = a^* {}_{\mathcal{H}} = {}_{\mathcal{H}}. \tag{63}$$

Juntando esses resultados obtemos

$$A = a P_a + {}_{\mathcal{H}} + {}_{\mathcal{H}} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp} = a P_a + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}. \tag{64}$$

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

$$(P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp})^\dagger \circ (P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) \tag{65}$$
$$= P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} \circ P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp} = P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp} \tag{66}$$
$$= P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ ({}_{\mathcal{H}} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) = P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ (P_a \circ A \circ P_{a^\perp} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) \tag{67}$$
$$= P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ ((P_a + P_{a^\perp}) \circ A \circ P_{a^\perp}) \tag{68}$$
$$= P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ (\mathbb{I}_{\mathcal{H}} \circ A \circ P_{a^\perp}) \tag{69}$$
$$= P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ A \circ P_{a^\perp} \tag{70}$$
$$= P_{a^\perp} \circ A \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} \tag{71}$$
$$= P_{a^\perp} \circ A \circ \mathbb{I}_{\mathcal{H}} \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} = P_{a^\perp} \circ A \circ (P_a + P_{a^\perp}) \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} \tag{72}$$
$$= (P_{a^\perp} \circ A \circ P_a + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} = ({}_{\mathcal{H}} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} \tag{73}$$
$$= (P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp})(P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp}). \tag{74}$$

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

$$A = a P_a + \tilde{a} P_{\tilde{a}} + P_{\tilde{a}^\perp} \circ \tilde{A} \circ P_{\tilde{a}^\perp}, \tag{75}$$

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 $P_a + P_{\tilde{a}} + \cdots = \mathbb{I}_{\mathcal{H}}$, teremos obtido a decomposição espectral de A. Com isso completamos a prova do teorema

$$A \circ A^\dagger = A^\dagger \circ A \Rightarrow \exists \{P_a\} \mid \sum_a P_a = \mathbb{I}_{\mathcal{H}} \text{ e } A = \sum_a a P_a. \tag{76}$$

2.2 Operadores Hermitianos

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

$$A^\dagger = A. \tag{77}$$

OBS: Se um operador linear $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ 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.

2.2.1 Teorema

Operdores 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

$$(|a'\rangle, A|a\rangle) = (|a'\rangle, a|a\rangle) = a(|a'\rangle, |a\rangle) \tag{78}$$

$$(A^\dagger|a'\rangle, |a\rangle) = (A|a'\rangle, |a\rangle) = (a'|a'\rangle, |a\rangle) \tag{79}$$

$$= a'^*(|a'\rangle, |a\rangle). \tag{80}$$

Portanto

$$(a - a'^*)\langle a'|a\rangle = 0. \tag{81}$$

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 números imaginários puros e que seus autovetores correspondentes a autovalores diferentes são ortogonais.

2.2.2 Comutador

O comutador entre dois operadores lineares $A, B : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ é um operado em $\mathcal{H}$ deinido por

$$[A, B] := A \circ B - B \circ A. \tag{82}$$

A importância desse operador é que se $[A, B] =$, 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:

$$[A, A^\dagger] = . \tag{83}$$

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

$$[X, Y + Z] = [X, Y] + [X, Z], \tag{84}$$

$$[X + Y, Z] = [X, Z] + [Y, Z], \tag{85}$$

$$[X, Y \circ Z] = Y \circ [X, Z] + [X, Y] \circ Z, \tag{86}$$

$$[X \circ Y, Z] = X \circ [Y, Z] + [X, Z] \circ Y. \tag{87}$$

As matrizes de Pauli são definidas por:

$$\sigma_x \equiv \sigma_1 := \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_y \equiv \sigma_2 := \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_z \equiv \sigma_3 := \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \tag{88}$$

Exercício: Verifique que para as matrizes de Pauli teremos

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{j,k}\sigma_0 + sgn(j,k,l)i\sigma_l. \tag{89}$$

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

$$[\sigma_j, \sigma_k] = sgn(j,k,l)2i\sigma_l. \tag{90}$$

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

$$\{A, B\} := A \circ B + B \circ A. \tag{91}$$

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

$$\{\sigma_j, \sigma_k\} :=_{\mathbb{C}^2}. \tag{92}$$

```
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]:
```

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

2.3 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.,

$$A = \sum_j a_j P_j \text{ e } B = \sum_j b_j P_j \Leftrightarrow [A, B] =_{\mathcal{H}}. \tag{93}$$

2.3.1 Prova

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

$$[A,B] = [\sum_j a_j P_j, \sum_k b_k P_k] = \sum_{j,k} a_j b_k [P_j, P_k] \tag{94}$$

$$= \sum_{j,k} a_j b_k (P_j \circ P_k - P_k \circ P_j) = \sum_{j,k} a_j b_k (\delta_{j,k} P_j - \delta_{k,j} P_k) \tag{95}$$

$$= \mathcal{H}. \tag{96}$$

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

$$A \circ (B \circ P_j) = (A \circ B) \circ P_j = (B \circ A) \circ P_j = B \circ (A \circ P_j) \tag{97}$$

$$= B \circ (a_j P_j) = a_j (B \circ P_j). \tag{98}$$

Para que essa relação seja verdaderia, 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 Herminiano, 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 $k = 1, \cdots, \dim \mathcal{H}_j$. Note que $\mathcal{H}_j \subseteq \mathcal{H}$ é o subespaço gerado pelo autovetores de A correspondentes ao autovalor a_j. Agora,

$$A(B|a_j^{(k)}\rangle) = (A \circ B)(|a_j^{(k)}\rangle) = (B \circ A)(|a_j^{(k)}\rangle) \tag{99}$$

$$= B(A(|a_j^{(k)}\rangle)) = B(a_j(|a_j^{(k)}\rangle)) \tag{100}$$

$$= a_j(B|a_j^{(k)}\rangle). \tag{101}$$

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.

2.4 Operadores unitários

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

$$A^\dagger \circ A = A \circ A^\dagger = \mathbb{I}_{\mathcal{H}}, \tag{102}$$

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

$$(A|v\rangle, A|w\rangle) = (A^\dagger \circ A|v\rangle, |w\rangle) = (\mathbb{I}_\mathcal{H}|v\rangle, |w\rangle) \tag{103}$$
$$= (|v\rangle, |w\rangle). \tag{104}$$

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

$$(A|a\rangle, A|a\rangle) = (a|a\rangle, a|a\rangle) = a^* a(|a\rangle, |a\rangle) = |a|^2\langle a|a\rangle \tag{105}$$
$$(A^\dagger \circ A|a\rangle, |a\rangle) = (\mathbb{I}_\mathcal{H}|a\rangle, |a\rangle) = \langle a|a\rangle. \tag{106}$$

   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:

$$\langle L_j^A|L_k^A\rangle = |L_j^A\rangle^\dagger L_k^A\rangle = \begin{bmatrix} A_{j,1}^* & A_{j,2}^* & \cdots & A_{j,d}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{k,1} \\ A_{k,2} \\ \vdots \\ A_{k,d} \end{bmatrix} \tag{107}$$
$$= A_{j,1}^* A_{k,1} + A_{j,2}^* A_{k,2} + \cdots + A_{j,d}^* A_{k,d} = \sum_{l=1}^{d} A_{k,l}(A^\dagger)_{l,j} \tag{108}$$
$$= (AA^\dagger)_{k,j} = (\mathbb{I}_d)_{k,j} \tag{109}$$
$$= \delta_{k,j}. \tag{110}$$

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