

# 03\_operators

September 9, 2019

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

In [2]: %run 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

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

Além disso, exigiremos que se  $A, B : V \rightarrow W$  são operadores lineares, então  $\forall |v\rangle \in V$  e  $\alpha, \beta \in \mathbb{F}$  devemos ter

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

**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

$$\mathbf{O}_V |v\rangle = |\emptyset\rangle, \forall |v\rangle \in V. \quad (4)$$

**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

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

### 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

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

$$\text{ou, equivalentemente, } |v'\rangle = A|v\rangle. \quad (7)$$

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

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

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

Ademais, como  $(\alpha A + \beta B)_{j,k} = \alpha A_{j,k} + \beta B_{j,k}$ , teremos que

$$((\alpha A + \beta B)(|v\rangle))_j = \sum_k (\alpha A + \beta B)_{j,k} |v\rangle_k = \sum_k (\alpha A_{j,k} + \beta B_{j,k}) |v\rangle_k = \alpha \sum_k A_{j,k} |v\rangle_k + \beta \sum_k B_{j,k} |v\rangle_k \quad (9)$$

$$= \alpha (A|v\rangle)_j + \beta (B|v\rangle)_j \quad (10)$$

e portanto  $(\alpha A + \beta B)(|v\rangle) = \alpha A(|v\rangle) + \beta B(|v\rangle)$ .

Os operadores identidade e nulo são identificados, respectivamente, com

$$\mathbb{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \text{ e } \mathbf{e} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}. \quad (11)$$

### 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 podemos escrever

$$A(|v_j\rangle) = \sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j} |w_k\rangle, \text{ para } j = 1, \dots, \dim V, \quad (12)$$

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

$$A \doteq \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & \cdots & A_{1,\dim V} \\ A_{2,1} & A_{2,2} & \cdots & A_{2,\dim V} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{\dim W,1} & A_{\dim W,2} & \cdots & A_{\dim W,\dim V} \end{bmatrix}. \quad (13)$$

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:

$$|w\rangle \doteq \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{\dim W} \end{bmatrix}. \quad (14)$$

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

$$A(|e_1\rangle) := |e_2\rangle \text{ e } A(|e_2\rangle) := |e_1\rangle. \quad (15)$$

Teremos assim que

$$A(|e_1\rangle) = \sum_{k=1}^2 A_{k,1} |e_k\rangle = A_{1,1} |e_1\rangle + A_{2,1} |e_2\rangle \text{ e } A(|e_2\rangle) = \sum_{k=1}^2 A_{k,2} |e_k\rangle = A_{1,2} |e_1\rangle + A_{2,2} |e_2\rangle. \quad (16)$$

Então, comparando a definição com estas últimas relações teremos

$$A \doteq \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} \\ A_{2,1} & A_{2,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (17)$$

**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.

**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  $A : V \rightarrow W$  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

$$A(|v_j\rangle) = \sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j} |w_k\rangle. \quad (18)$$

Seguindo,

$$(B \circ A)(|v_j\rangle) \equiv B(A(|v_j\rangle)) = B\left(\sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j}|w_k\rangle\right) = \sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j}B(|w_k\rangle) = \sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j} \sum_{l=1}^{\dim X} B_{l,k}|x_l\rangle \quad (19)$$

$$= \sum_{l=1}^{\dim X} \left( \sum_{k=1}^{\dim W} B_{l,k} A_{k,j} \right) |x_l\rangle =: \sum_{l=1}^{\dim X} C_{l,j} |x_l\rangle =: C(|v_j\rangle). \quad (20)$$

**Exercício:** Forneça a representação matricial para  $C = B \circ A$ , com  $A$  e  $B$  sendo 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

$$A|a\rangle \propto |a\rangle =: \alpha|a\rangle, \quad (21)$$

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

$$A|a_{\pm}\rangle = A(|e_1\rangle \pm |e_2\rangle) = A|e_1\rangle \pm A|e_2\rangle = |e_2\rangle \pm |e_1\rangle = \pm(|e_1\rangle \pm |e_2\rangle) = (\pm 1)|a_{\pm}\rangle = \alpha_{\pm}|a_{\pm}\rangle. \quad (22)$$

### 1.1.1 Equação característica

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

$$A|a\rangle = \alpha \mathbb{I}|a\rangle \quad \therefore (A - \alpha \mathbb{I})|a\rangle = |\emptyset\rangle. \quad (23)$$

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

$$\det(A - \alpha \mathbb{I}) = \det \begin{bmatrix} A_{1,1} - \alpha & A_{1,2} & \cdots & A_{1,\dim V} \\ A_{2,1} & A_{2,2} - \alpha & \cdots & A_{2,\dim V} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{\dim V,1} & A_{\dim V,2} & \cdots & A_{\dim V,\dim V} - \alpha \end{bmatrix} = 0. \quad (24)$$

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

$$c_n \alpha^n + c_{n-1} \alpha^{n-1} + \cdots + c_2 \alpha^2 + c_1 \alpha + c_0 = 0, \quad (25)$$

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

```
In [11]: 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[11]:

$$\left[ \left( \frac{a}{2} + \frac{d}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{a^2 - 2ad + 4bc + d^2}, \quad 1, \quad \left[ \left[ -\frac{\frac{a}{2} - \frac{d}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{a^2 - 2ad + 4bc + d^2}}{1} \right] \right] \right), \left( \frac{a}{2} + \frac{d}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{a^2 - 2ad + 4bc + d^2}, \right.$$

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

$$\det(\sigma_y - \alpha \mathbb{I}_2) = \det \begin{bmatrix} -\alpha & 1 \\ 1 & -\alpha \end{bmatrix} = \alpha^2 - 1 = 0 \Rightarrow \alpha = \pm 1. \quad (26)$$

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

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = (1) \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \Rightarrow b = a = 1 \Rightarrow |\alpha = 1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (27)$$

Para  $\alpha = -1$  teremos

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = (-1) \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \Rightarrow b = -a = 1 \Rightarrow |\alpha = -1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (28)$$

**Exercício:** Calcule os autovalores e autovetores da matriz  $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$ .

### 1.1.2 Adjunto de um operador linear

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

$$(|v\rangle, A|w\rangle) = (A^\dagger|v\rangle, |w\rangle), \forall |v\rangle, |w\rangle \in V. \quad (29)$$

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

$$(|v\rangle, A|w\rangle) = \left( \sum_{j=1}^{\dim V} v_j |b_j\rangle, A \sum_{k=1}^{\dim V} w_k |b_k\rangle \right) = \left( \sum_{j=1}^{\dim V} v_j |b_j\rangle, \sum_{k=1}^{\dim V} w_k A|b_k\rangle \right) \quad (30)$$

$$= \sum_{j,k=1}^{\dim V} v_j^* w_k (|b_j\rangle, \sum_{l=1}^{\dim V} A_{l,k} |b_l\rangle) = \sum_{j,k,l=1}^{\dim V} v_j^* w_k A_{l,k} (|b_j\rangle, |b_l\rangle) = \sum_{j,k,l=1}^{\dim V} v_j^* w_k A_{l,k} \delta_{j,l} \quad (31)$$

$$= \sum_{j,k=1}^{\dim V} v_j^* w_k A_{j,k} \quad (32)$$

e

$$(A^\dagger |v\rangle, |w\rangle) = (A^\dagger \sum_{j=1}^{\dim V} v_j |b_j\rangle, \sum_{k=1}^{\dim V} w_k |b_k\rangle) = \left( \sum_{j=1}^{\dim V} v_j A^\dagger |b_j\rangle, \sum_{k=1}^{\dim V} w_k |b_k\rangle \right) \quad (33)$$

$$= \sum_{j,k=1}^{\dim V} v_j^* w_k \left( \sum_{l=1}^{\dim V} (A^\dagger)_{l,j} |b_l\rangle, |b_k\rangle \right) = \sum_{j,k,l=1}^{\dim V} v_j^* w_k (A_{l,j}^\dagger)^* (|b_l\rangle, |b_k\rangle) = \sum_{j,k,l=1}^{\dim V} v_j^* w_k (A_{l,j}^\dagger)^* \delta_{l,k} \quad (34)$$

$$= \sum_{j,k=1}^{\dim V} v_j^* w_k (A_{k,j}^\dagger)^*. \quad (35)$$

Ou seja,

$$(|v\rangle, A|w\rangle) = (A^\dagger |v\rangle, |w\rangle) \Rightarrow (A^\dagger)_{j,k} = A_{k,j}^* \quad (36)$$

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

$$(A^\dagger |a\rangle, |a\rangle) = (|a\rangle, A|a\rangle) = (|a\rangle, \alpha|a\rangle) = \alpha(|a\rangle, |a\rangle) = (\alpha^* |a\rangle, |a\rangle), \quad (37)$$

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

**Exercício:** Verifique 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

$$P_W(|v\rangle) := \sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j | v \rangle |w_j\rangle, \quad (38)$$

com  $|v\rangle \in V$ .

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

$$|v\rangle^\dagger = \langle v| \quad (39)$$

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

$$P_W = \sum_{j=1}^{\dim W} |w_j\rangle \langle w_j|. \quad (40)$$

**Exercício:** Escreva explicitamente o projetor em um subespaço do espaço de Hilbert  $\mathcal{H} = (\mathbb{C}^{n \times n}, \langle A|B \rangle_{hs} = \text{Tr}(A^\dagger B))$ .

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

$$P_W(|w\rangle) := \sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|w\rangle |w_j\rangle = |w\rangle = \mathbb{I}_W(|w\rangle). \quad (41)$$

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

$$|v\rangle = \sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|v\rangle |w_j\rangle + \sum_{k=\dim W+1}^{\dim V} \langle w_k^\perp|v\rangle |w_k^\perp\rangle. \quad (42)$$

Então

$$P_W(|v\rangle) = \sum_{l=1}^{\dim W} \langle w_l|v\rangle |w_l\rangle = \sum_{l=1}^{\dim W} \sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|v\rangle \langle w_l|w_j\rangle |w_l\rangle + \sum_{l=1}^{\dim W} \sum_{k=\dim W+1}^{\dim V} \langle w_k^\perp|v\rangle \langle w_l|w_k^\perp\rangle |w_l\rangle \quad (43)$$

$$= \sum_{l=1}^{\dim W} \sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|v\rangle \delta_{l,j} |w_l\rangle + \sum_{l=1}^{\dim W} \sum_{k=\dim W+1}^{\dim V} \langle w_k^\perp|v\rangle 0 |w_l\rangle = \sum_{l=1}^{\dim W} \langle w_l|v\rangle |w_l\rangle \in W. \quad (44)$$

**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

$$P_W \circ P_X = P_X \circ P_W = \mathbf{O}_V. \quad (45)$$

### 1.2.1 Adjunto de projetores

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

$$(P_W^\dagger |a\rangle, |b\rangle) = (|a\rangle, P_W(|b\rangle)) = (|a\rangle, \sum_j \langle w_j|b\rangle |w_j\rangle) = \sum_j \langle w_j|b\rangle (|a\rangle, |w_j\rangle) = \sum_j \langle w_j|b\rangle \langle w_j|a\rangle^* \quad (46)$$

$$= \sum_j \langle w_j|a\rangle^* (\langle w_j|, |b\rangle) = (\sum_j \langle w_j|a\rangle |w_j\rangle, |b\rangle) = (P_W |a\rangle, |b\rangle). \quad (47)$$

**Exercício:** Verifique essa 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

$$P_W + P_{W^\perp} = \mathbb{I}_V. \quad (48)$$

Para esses projetores, teremos

$$P_W \circ P_{W^\perp}(|v\rangle) = P_W \circ (\mathbb{I}_V - P_W)(|v\rangle) = P_W \circ \mathbb{I}_V(|v\rangle) - P_W \circ P_W(|v\rangle) = P_W(|v\rangle) - P_W(|v\rangle) \quad (49)$$

$$= \mathbb{O}_V(|v\rangle). \quad (50)$$

**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  $P_1$ ?

## 2 Operadores normais

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

$$A \circ A^\dagger = A^\dagger \circ A. \quad (51)$$

## 3 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 este for normal.

### 3.1 Prova

Vamos começar assumindo a existência de uma base ortonormal  $\{|a\rangle\} \in \mathcal{H}$  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  $|v\rangle \in \mathcal{H}$ :

$$P_a(|v\rangle) = \langle a|v\rangle |a\rangle. \quad (52)$$

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

$$A(|v\rangle) = A\left(\sum_a \langle a|v\rangle |a\rangle\right) = \sum_a \langle a|v\rangle A(|a\rangle) = \sum_a \langle a|v\rangle a(|a\rangle) = \sum_a a \langle a|v\rangle (|a\rangle) = \sum_a a P_a(|v\rangle). \quad (53)$$

Essa é a chamada *decomposição espectral*:

$$A = \sum_a a P_a. \quad (54)$$

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

$$\left(\sum_a P_a\right)(|v\rangle) = \sum_a P_a(|v\rangle) = \sum_a \langle a|v\rangle |a\rangle = |v\rangle = \mathbb{I}_{\mathcal{H}} |v\rangle. \quad (55)$$



Portanto, nesse caso,

$$\sum_a P_a = \mathbb{I}_{\mathcal{H}}. \quad (56)$$

**Exercício:** Assumindo que existe uma base ortonormal  $\{|a\rangle\} \in \mathcal{H}$  tal que  $A^\dagger|a\rangle := a^*|a\rangle$ , verifique que podemos escrever a decomposição espectral  $A^\dagger = \sum_a a^* P_a$ .

Com isso podemos escrever

$$A \circ A^\dagger(|v\rangle) = \left(\sum_a a P_a\right) \circ \left(\sum_{a'} a'^* P_{a'}\right)(|v\rangle) = \left(\sum_a a P_a\right) \circ \left(\sum_{a'} a'^* P_{a'}(|v\rangle)\right) = \sum_{a,a'} a a'^* P_a(P_{a'}(|v\rangle)) \quad (57)$$

$$= \sum_{a,a'} a a'^* (P_a \circ P_{a'})(|v\rangle) = \sum_{a,a'} a a'^* (\delta_{a,a'} P_a)(|v\rangle) = \sum_a |a|^2 P_a(|v\rangle). \quad (58)$$

E

$$A^\dagger \circ A(|v\rangle) = \left(\sum_a a^* P_a\right) \circ \left(\sum_{a'} a' P_{a'}\right)(|v\rangle) = \left(\sum_a a^* P_a\right) \circ \left(\sum_{a'} a' P_{a'}(|v\rangle)\right) = \sum_{a,a'} a^* a' P_a(P_{a'}(|v\rangle)) \quad (59)$$

$$= \sum_{a,a'} a^* a' (P_a \circ P_{a'})(|v\rangle) = \sum_{a,a'} a^* a' (\delta_{a,a'} P_a)(|v\rangle) = \sum_a |a|^2 P_a(|v\rangle). \quad (60)$$

Por conseguinte,

$$\exists\{|a\rangle\} \mid A = \sum_a a P_a \text{ with } P_a P_{a'} = \delta_{a,a'} P_a \text{ e } \sum_a P_a = \mathbb{I}_{\mathcal{H}} \Rightarrow A \circ A^\dagger = A^\dagger \circ A. \quad (61)$$

Passemos para a segunda parte da prova, onde assumimos que  $A$  é normal, i.e. que  $A \circ A^\dagger = A^\dagger \circ A$ , 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

$$A = \mathbb{I}_{\mathcal{H}} \circ A \circ \mathbb{I}_{\mathcal{H}} = (P_a + P_{a^\perp}) \circ A \circ (P_a + P_{a^\perp}) \quad (62)$$

$$= P_a \circ A \circ P_a + P_a \circ A \circ P_{a^\perp} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_a + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}. \quad (63)$$

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

$$(A \circ P_a)(|v\rangle) = A(P_a(|v\rangle)) = A\left(\sum_a \langle a|v\rangle |a\rangle\right) = \sum_a \langle a|v\rangle A(|a\rangle) = \sum_a \langle a|v\rangle a |a\rangle \quad (64)$$

$$= a \sum_a \langle a|v\rangle |a\rangle = a P_a(|v\rangle). \quad (65)$$

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

Assim

$$P_a \circ A \circ P_a = P_a \circ a P_a = a P_a \circ P_a = a P_a, \quad (66)$$

$$P_{a^\perp} \circ A \circ P_a = P_{a^\perp} \circ a P_a = a P_{a^\perp} \circ P_a = \mathbf{0}_{\mathcal{H}}. \quad (67)$$

Com isso teremos que

$$(P_a \circ A \circ P_{a^\perp})^\dagger = P_{a^\perp}^\dagger \circ A^\dagger \circ P_a^\dagger = P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ P_a = P_{a^\perp} \circ a^* P_a = a^* P_{a^\perp} \circ P_a = a^* \mathbb{O}_{\mathcal{H}} = \mathbb{O}_{\mathcal{H}}. \quad (68)$$

Juntando esses resultados obtemos

$$A = aP_a + \mathbb{O}_{\mathcal{H}} + \mathbb{O}_{\mathcal{H}} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp} = aP_a + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}. \quad (69)$$

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

$$(P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp})^\dagger \circ (P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) \quad (70)$$

$$= P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} \circ P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp} = P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp} \quad (71)$$

$$= P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ (\mathcal{H} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) = P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ (P_a \circ A \circ P_{a^\perp} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) \quad (72)$$

$$= P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ ((P_a + P_{a^\perp}) \circ A \circ P_{a^\perp}) = P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ (\mathbb{I}_{\mathcal{H}} \circ A \circ P_{a^\perp}) = P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ A \circ P_{a^\perp} \quad (73)$$

$$= P_{a^\perp} \circ A \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} = P_{a^\perp} \circ A \circ \mathbb{I}_{\mathcal{H}} \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} = P_{a^\perp} \circ A \circ (P_a + P_{a^\perp}) \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} \quad (74)$$

$$= (P_{a^\perp} \circ A \circ P_a + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} = (\mathbb{O}_{\mathcal{H}} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} \quad (75)$$

$$= (P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) \circ (P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp}) = (P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) \circ (P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp})^\dagger. \quad (76)$$

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

$$A = aP_a + \tilde{a}P_{\tilde{a}} + P_{\tilde{a}^\perp} \circ \tilde{A} \circ P_{\tilde{a}^\perp}, \quad (77)$$

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

$$A \circ A^\dagger = A^\dagger \circ A \Rightarrow \exists \{P_a\} \mid \sum_a P_a = \mathbb{I}_{\mathcal{H}} \text{ e } A = \sum_a aP_a. \quad (78)$$

**Exercício:** Verifique que a matriz  $A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$  é normal e obtenha sua decomposição espectral.

## 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.,

$$A^\dagger = A. \quad (79)$$

**OBS:** Se um operador linear  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  é Hermitiano, ele também é normal e por conseguinte possui uma decomposição espectral em uma base ortonormal. 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.

## 4.1 Teorema

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

### 4.1.1 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

$$(|a'\rangle, A|a\rangle) = (|a'\rangle, a|a\rangle) = a(|a'\rangle, |a\rangle) \quad (80)$$

$$(A^\dagger|a'\rangle, |a\rangle) = (A|a'\rangle, |a\rangle) = (a'|a'\rangle, |a\rangle) = a'^*(|a'\rangle, |a\rangle). \quad (81)$$

Portanto

$$(a - a'^*)(|a'\rangle, |a\rangle) = 0. \quad (82)$$

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

**Exercício:** Verifique que a matriz  $\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$  é Hermitiana. Obtenha seus autovalores e autovetores e verifique que estes estão de acordo com o último teorema.

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

## 4.2 Comutador e anti-comutador

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

$$[A, B] := A \circ B - B \circ A. \quad (83)$$

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:

$$[A, A^\dagger] = 0. \quad (84)$$

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

$$[X, Y + Z] = [X, Y] + [X, Z], \quad (85)$$

$$[X + Y, Z] = [X, Z] + [Y, Z], \quad (86)$$

$$[X, Y \circ Z] = Y \circ [X, Z] + [X, Y] \circ Z, \quad (87)$$

$$[X \circ Y, Z] = X \circ [Y, Z] + [X, Z] \circ Y. \quad (88)$$

A matriz identidade 2x2 e as matrizes de Pauli são definidas por:

$$\mathbb{I}_2 \equiv \sigma_0 := \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \sigma_x \equiv \sigma_1 := \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_y \equiv \sigma_2 := \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_z \equiv \sigma_3 := \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (89)$$

**Exercício:** Verifique que para as matrizes de Pauli teremos (use o código abaixo para facilitar a resolução desses três exercícios)

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{j,k} \sigma_0 + \text{sgn}(j,k,l) i \sigma_l, \quad j, k = 1, 2, 3. \quad (90)$$

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

$$[\sigma_j, \sigma_k] = \text{sgn}(j,k,l) 2i \sigma_l, \quad j, k = 1, 2, 3. \quad (91)$$

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

$$\{A, B\} := A \circ B + B \circ A. \quad (92)$$

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

$$\{\sigma_j, \sigma_k\} := \mathbb{C}^2, \quad \forall j \neq k \text{ e } j, k = 1, 2, 3. \quad (93)$$

```
In [5]: def comm(A,B):
        return A*B-B*A
```

```
In [10]: def acomm(A,B):
        return A*B+B*A
```

```
In [8]: def pauli(j):
        if j == 0:
            return Matrix([[1,0],[0,1]])
        elif j == 1:
            return Matrix([[0,1],[1,0]])
        elif j == 2:
            return Matrix([[0,-1j],[1j,0]])
        elif j == 3:
            return Matrix([[1,0],[0,-1]])
```

```
In [14]: comm(pauli(1),pauli(2))
```

Out[14]:

$$\begin{bmatrix} 2.0i & 0 \\ 0 & -2.0i \end{bmatrix}$$

```
In [11]: acomm(pauli(1),pauli(2))
```

Out[11]:

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

## 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.,

$$A = \sum_j a_j P_j \text{ e } B = \sum_j b_j P_j \Leftrightarrow [A, B] = \mathcal{H}. \quad (94)$$

### 5.1 Prova

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

$$[A, B] = [\sum_j a_j P_j, \sum_k b_k P_k] = \sum_{j,k} a_j b_k [P_j, P_k] \quad (95)$$

$$= \sum_{j,k} a_j b_k (P_j \circ P_k - P_k \circ P_j) = \sum_{j,k} a_j b_k (\delta_{j,k} P_j - \delta_{k,j} P_k) \quad (96)$$

$$= \sum_j a_j b_j (P_j - P_j) = \mathcal{H}. \quad (97)$$

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

$$A \circ B \circ P_j = B \circ A \circ P_j = B \circ A \circ P_j = B \circ a_j P_j = a_j B \circ P_j. \quad (98)$$

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 e autovetores:  $A|a_j^{(k)}\rangle = a_j|a_j^{(k)}\rangle$  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,

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

$$= a_j(B|a_j^{(k)}\rangle). \quad (100)$$

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 se  $\sigma_x$  e  $\sigma_y$  compartilham ou não a mesma base de autovetores. Obtenha essas bases.

## 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

$$A^\dagger \circ A = A \circ A^\dagger = \mathbb{I}_{\mathcal{H}}. \quad (101)$$

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

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

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

$$(A|v\rangle, A|w\rangle) = (A^\dagger \circ A|v\rangle, |w\rangle) = (\mathbb{I}_{\mathcal{H}}|v\rangle, |w\rangle) = (|v\rangle, |w\rangle). \quad (102)$$

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

$$(A|a\rangle, A|a\rangle) = (a|a\rangle, a|a\rangle) = a^* a (|a\rangle, |a\rangle) = |a|^2 \langle a|a\rangle \quad (103)$$

$$(A^\dagger \circ A|a\rangle, |a\rangle) = (\mathbb{I}_{\mathcal{H}}|a\rangle, |a\rangle) = \langle a|a\rangle. \quad (104)$$

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  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$  é um conjunto ortonormal:

$$\langle L_j^A | L_k^A \rangle = |L_j^A\rangle^\dagger L_k^A = \begin{bmatrix} A_{j,1}^* & A_{j,2}^* & \cdots & A_{j,n}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{k,1} \\ A_{k,2} \\ \vdots \\ A_{k,n} \end{bmatrix} \quad (105)$$

$$= A_{j,1}^* A_{k,1} + A_{j,2}^* A_{k,2} + \cdots + A_{j,n}^* A_{k,n} = \sum_{l=1}^n A_{k,l} (A^\dagger)_{l,j} = (AA^\dagger)_{k,j} = (\mathbb{I}_n)_{k,j} \quad (106)$$

$$= \delta_{k,j}. \quad (107)$$

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

**Exercício:** Se lhes é fornecida uma matriz  $A$  cujos vetores coluna formam uma base LI, qual procedimento podemos utilizar para obter uma matriz unitária a partir de  $A$ .