

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 $A : V \rightarrow W$ (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

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

ou, equivalentemente, $|v'\rangle = A|v\rangle$. (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 $A(\sum_j c_j |w_j\rangle) = \sum_j c_j A(|w_j\rangle)$ e portanto que matrizes são operadores lineares. Ademais, como $(A+B)_{j,k} = A_{j,k} + B_{j,k}$, teremos que

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

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

Os operadores identidade e nulo são identificados, respectivamente, com

$$\mathbb{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \text{ e } 0 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}. \quad (10)$$

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

$$A(|v_j\rangle) = \sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j} |w_k\rangle, \quad (11)$$

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

$$A \doteq \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & \cdots & A_{1,\dim V} \\ A_{2,1} & A_{2,2} & \cdots & A_{2,\dim V} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{\dim W,1} & A_{\dim W,2} & \cdots & A_{\dim W,\dim V} \end{bmatrix}. \quad (12)$$

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:

$$|w\rangle \doteq \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{\dim W} \end{bmatrix}. \quad (13)$$

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

$$A(|e_1\rangle) := |e_2\rangle \text{ e } A(|e_2\rangle) := |e_1\rangle. \quad (14)$$

Teremos assim que

$$A(|e_1\rangle) = \sum_{k=1}^2 A_{k,1}|e_k\rangle = A_{1,1}|e_1\rangle + A_{2,1}|e_2\rangle \text{ e } A(|e_2\rangle) = \sum_{k=1}^2 A_{k,2}|e_k\rangle = A_{1,2}|e_1\rangle + A_{2,2}|e_2\rangle. \quad (15)$$

Então, comparando a definição com estas últimas relações teremos

$$A \doteq \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} \\ A_{2,1} & A_{2,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (16)$$

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

$$A(|v_j\rangle) = \sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j}|w_k\rangle. \quad (17)$$

Seguindo,

$$(B \circ A)(|v_j\rangle) \equiv B(A(|v_j\rangle)) = B\left(\sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j}|w_k\rangle\right) = \sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j}B(|w_k\rangle) = \sum_{k=1}^{\dim W} A_{k,j} \sum_{l=1}^{\dim X} B_{l,k}|x_l\rangle \quad (18)$$

$$= \sum_{l=1}^{\dim X} \left(\sum_{k=1}^{\dim W} B_{l,k} A_{k,j} \right) |x_l\rangle =: \sum_{l=1}^{\dim X} C_{l,j}|x_l\rangle =: C(|v_j\rangle). \quad (19)$$

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

$$A|a\rangle \propto |a\rangle =: \alpha|a\rangle, \quad (20)$$

dizemos que $|a\rangle$ é um autovetor de A e α é o autovalor A correspondente 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

$$A|a_{\pm}\rangle = A(|e_1\rangle \pm |e_2\rangle) = A|e_1\rangle \pm A|e_2\rangle = |e_2\rangle \pm |e_1\rangle = \pm(|e_1\rangle \pm |e_2\rangle) = (\pm 1)|a_{\pm}\rangle = \alpha_{\pm}|a_{\pm}\rangle. \quad (21)$$

1.1.1 Equação característica

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

$$A|a\rangle = \alpha \mathbb{I}|a\rangle \quad \therefore (A - \alpha \mathbb{I})|a\rangle = |\emptyset\rangle. \quad (22)$$

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:

$$\det(A - \alpha \mathbb{I}) = \det \begin{bmatrix} A_{1,1} - \alpha & A_{1,2} & \cdots & A_{1,\dim V} \\ A_{2,1} & A_{2,2} - \alpha & \cdots & A_{2,\dim V} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{\dim V,1} & A_{\dim V,2} & \cdots & A_{\dim V,\dim V} - \alpha \end{bmatrix} = 0. \quad (23)$$

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

$$c_n \alpha^n + c_{n-1} \alpha^{n-1} + \cdots + c_2 \alpha^2 + c_1 \alpha + c_0 = 0, \quad (24)$$

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]:

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

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

$$\det(\sigma_y - \alpha \mathbb{I}_2) = \det \begin{bmatrix} -\alpha & 1 \\ 1 & -\alpha \end{bmatrix} = \alpha^2 - 1 = 0 \Rightarrow \alpha = \pm 1. \quad (25)$$

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

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

Para $\alpha = -1$ teremos

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

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

$$(|v\rangle, A|w\rangle) = (A^\dagger|v\rangle, |w\rangle), \forall |v\rangle, |w\rangle \in V. \quad (28)$$

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

$$(|v\rangle, A|w\rangle) = \left(\sum_{j=1}^{\dim V} v_j |b_j\rangle, A \sum_{k=1}^{\dim V} w_k |b_k\rangle \right) = \left(\sum_{j=1}^{\dim V} v_j |b_j\rangle, \sum_{k=1}^{\dim V} w_k A|b_k\rangle \right) = \sum_{j,k=1}^{\dim V} v_j^* w_k (|b_j\rangle, \sum_{l=1}^{\dim V} A_{l,k} |b_l\rangle) \quad (29)$$

$$= \sum_{j,k,l=1}^{\dim V} v_j^* w_k A_{l,k} (|b_j\rangle, |b_l\rangle) = \sum_{j,k,l=1}^{\dim V} v_j^* w_k A_{l,k} \delta_{j,l} = \sum_{j,k=1}^{\dim V} v_j^* w_k A_{j,k} \quad (30)$$

e

$$(A^\dagger|v\rangle, |w\rangle) = (A^\dagger \sum_{j=1}^{\dim V} v_j |b_j\rangle, \sum_{k=1}^{\dim V} w_k |b_k\rangle) = \left(\sum_{j=1}^{\dim V} v_j A^\dagger |b_j\rangle, \sum_{k=1}^{\dim V} w_k |b_k\rangle \right) = \sum_{j,k=1}^{\dim V} v_j^* w_k \left(\sum_{l=1}^{\dim V} (A^\dagger)_{l,j} |b_l\rangle, |b_k\rangle \right) \quad (31)$$

$$= \sum_{j,k,l=1}^{\dim V} v_j^* w_k (A_{l,j}^\dagger)^* (|b_l\rangle, |b_k\rangle) = \sum_{j,k,l=1}^{\dim V} v_j^* w_k (A_{l,j}^\dagger)^* \delta_{l,k} = \sum_{j,k=1}^{\dim V} v_j^* w_k (A_{k,j}^\dagger)^*. \quad (32)$$

Ou seja,

$$(|v\rangle, A|w\rangle) = (A^\dagger|v\rangle, |w\rangle) \Rightarrow (A^\dagger)_{j,k} = A_{k,j}^* \quad (33)$$

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

$$(A^\dagger|a\rangle, |a\rangle) = (|a\rangle, A|a\rangle) = (|a\rangle, \alpha|a\rangle) = \alpha(|a\rangle, |a\rangle) = (\alpha^*|a\rangle, |a\rangle), \quad (34)$$

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 $A, B : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, 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

$$P_W(|v\rangle) := \sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|v\rangle |w_j\rangle, \quad (35)$$

com $|v\rangle \in V$.

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

$$|v\rangle^\dagger = \langle v| \quad (36)$$

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

$$P_W = \sum_{j=1}^{\dim W} |w_j\rangle \langle w_j|. \quad (37)$$

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

$$P_W(|w\rangle) := \sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|w\rangle |w_j\rangle = |w\rangle = \mathbb{I}_W(|w\rangle). \quad (38)$$

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

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

Então

$$P_W(|v\rangle) = \sum_{l=1}^{\dim W} \langle w_l|v\rangle |w_l\rangle = \sum_{l=1}^{\dim W} \sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|v\rangle \langle w_l|w_j\rangle |w_l\rangle + \sum_{l=1}^{\dim W} \sum_{k=\dim W+1}^{\dim V} \langle w_k^\perp|v\rangle \langle w_l|w_k^\perp\rangle |w_l\rangle \quad (40)$$

$$= \sum_{l=1}^{\dim W} \sum_{j=1}^{\dim W} \langle w_j|v\rangle \delta_{l,j} |w_l\rangle + \sum_{l=1}^{\dim W} \sum_{k=\dim W+1}^{\dim V} \langle w_k^\perp|v\rangle 0 |w_l\rangle = \sum_{l=1}^{\dim W} \langle w_l|v\rangle |w_l\rangle \in W. \quad (41)$$

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

$$P_W \circ P_X = P_X \circ P_W = . \quad (42)$$

1.2.1 Adjunto de projetores

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

$$(P_W^\dagger |a\rangle, |b\rangle) = (|a\rangle, P_W(|b\rangle)) = (|a\rangle, \sum_j \langle w_j|b\rangle |w_j\rangle) = \sum_j \langle w_j|b\rangle (|a\rangle, |w_j\rangle) = \sum_j \langle w_j|b\rangle \langle w_j|a\rangle^* \quad (43)$$

$$= \sum_j \langle w_j|a\rangle^* (|w_j\rangle, |b\rangle) = (\sum_j \langle w_j|a\rangle |w_j\rangle, |b\rangle) = (P_W |a\rangle, |b\rangle). \quad (44)$$

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

$$P_W + P_{W^\perp} = \mathbb{I}_V. \quad (45)$$

Para esses projetores, teremos

$$P_W \circ P_{W^\perp}(|v\rangle) = P_W \circ (\mathbb{I}_V - P_W)(|v\rangle) = P_W \circ \mathbb{I}_V(|v\rangle) - P_W \circ P_W(|v\rangle) = P_W(|v\rangle) - P_W(|v\rangle) = 0. \quad (46)$$

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

$$A \circ A^\dagger = A^\dagger \circ A. \quad (47)$$

2.1 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 $|v\rangle \in \mathcal{H}$:

$$P_a(|v\rangle) = \langle a|v\rangle |a\rangle. \quad (48)$$

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

$$A(|v\rangle) = A\left(\sum_a \langle a|v\rangle |a\rangle\right) = \sum_a \langle a|v\rangle A(|a\rangle) = \sum_a \langle a|v\rangle a(|a\rangle) = \sum_a a \langle a|v\rangle (|a\rangle) = \sum_a a P_a(|v\rangle). \quad (49)$$

Essa é a chamada *decomposição espectral*:

$$A = \sum_a a P_a. \quad (50)$$

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

$$\left(\sum_a P_a\right)(|v\rangle) = \sum_a P_a(|v\rangle) = \sum_a \langle a|v\rangle |a\rangle = |v\rangle = \mathbb{I}_{\mathcal{H}} |v\rangle. \quad (51)$$

Portanto, nesse caso,

$$\sum_a P_a = \mathbb{I}_{\mathcal{H}}. \quad (52)$$

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

$$A \circ A^\dagger(|v\rangle) = \left(\sum_a a P_a\right) \circ \left(\sum_{a'} a'^* P_{a'}\right)(|v\rangle) = \left(\sum_a a P_a\right) \circ \left(\sum_{a'} a'^* P_{a'}(|v\rangle)\right) = \sum_{a,a'} a a'^* P_a(P_{a'}(|v\rangle)) \quad (53)$$

$$= \sum_{a,a'} a a'^* (P_a \circ P_{a'})(|v\rangle) = \sum_{a,a'} a a'^* (\delta_{a,a'} P_a)(|v\rangle) = \sum_a |a|^2 P_a(|v\rangle). \quad (54)$$

E

$$A^\dagger \circ A(|v\rangle) = \left(\sum_a a^* P_a\right) \circ \left(\sum_{a'} a' P_{a'}\right)(|v\rangle) = \left(\sum_a a^* P_a\right) \circ \left(\sum_{a'} a' P_{a'}(|v\rangle)\right) = \sum_{a,a'} a^* a' P_a(P_{a'}(|v\rangle)) \quad (55)$$

$$= \sum_{a,a'} a^* a' (P_a \circ P_{a'})(|v\rangle) = \sum_{a,a'} a^* a' (\delta_{a,a'} P_a)(|v\rangle) = \sum_a |a|^2 P_a(|v\rangle). \quad (56)$$

Por conseguinte,

$$\exists \{|a\rangle\} \mid A = \sum_a a P_a \text{ with } P_a P_{a'} = \delta_{a,a'} P_a \text{ e } \sum_a P_a = \mathbb{I}_{\mathcal{H}} \Rightarrow A \circ A^\dagger = A^\dagger \circ A. \quad (57)$$

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

$$A = \mathbb{I}_{\mathcal{H}} \circ A \circ \mathbb{I}_{\mathcal{H}} = (P_a + P_{a^\perp}) \circ A \circ (P_a + P_{a^\perp}) \quad (58)$$

$$= P_a \circ A \circ P_a + P_a \circ A \circ P_{a^\perp} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_a + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}. \quad (59)$$

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

$$(A \circ P_a)(|v\rangle) = A(P_a(|v\rangle)) = A\left(\sum_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_a} \langle a_j|v\rangle |a_j\rangle\right) = \sum_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_a} \langle a_j|v\rangle A(|a_j\rangle) = \sum_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_a} \langle a_j|v\rangle a |a_j\rangle = a \sum_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_a} \langle a_j|v\rangle |a_j\rangle \quad (60)$$

$$= a P_a(|v\rangle). \quad (61)$$

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

Assim

$$P_a \circ A \circ P_a = P_a \circ a P_a = a P_a \circ P_a = a P_a, \quad (62)$$

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

Com isso teremos que

$$(P_a \circ A \circ P_{a^\perp})^\dagger = P_{a^\perp}^\dagger \circ A^\dagger \circ P_a^\dagger = P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ P_a = P_{a^\perp} \circ a^* P_a = a^* P_{a^\perp} \circ P_a = a^* \mathcal{H} = \mathcal{H}. \quad (64)$$

Juntando esses resultados obtemos

$$A = a P_a + \mathcal{H} + \mathcal{H} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp} = a P_a + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}. \quad (65)$$

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

$$(P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp})^\dagger \circ (P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) = P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} \circ P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp} = P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp} \quad (66)$$

$$= P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ (\mathcal{H} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) = P_{a^\perp} \circ A^\dagger \circ (P_a \circ A \circ P_{a^\perp} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) \quad (67)$$

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

$$= P_{a^\perp} \circ A \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} = P_{a^\perp} \circ A \circ \mathbb{I}_{\mathcal{H}} \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} = P_{a^\perp} \circ A \circ (P_a + P_{a^\perp}) \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} \quad (69)$$

$$= (P_{a^\perp} \circ A \circ P_a + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} = (\mathcal{H} + P_{a^\perp} \circ A \circ P_{a^\perp}) \circ A^\dagger \circ P_{a^\perp} \quad (70)$$

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

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

$$A = aP_a + \tilde{a}P_{\tilde{a}} + P_{\tilde{a}^\perp} \circ \tilde{A} \circ P_{\tilde{a}^\perp}, \quad (72)$$

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

$$A \circ A^\dagger = A^\dagger \circ A \Rightarrow \exists \{P_a\} \mid \sum_a P_a = \mathbb{I}_{\mathcal{H}} \text{ e } A = \sum_a aP_a. \quad (73)$$

2.2 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.,

$$A^\dagger = A. \quad (74)$$

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.

2.2.1 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

$$(|a'\rangle, A|a\rangle) = (|a'\rangle, a|a\rangle) = a(|a'\rangle, |a\rangle) \quad (75)$$

$$(A^\dagger|a'\rangle, |a\rangle) = (A|a'\rangle, |a\rangle) = (a'|a'\rangle, |a\rangle) \quad (76)$$

$$= a'^*(|a'\rangle, |a\rangle). \quad (77)$$

Portanto

$$(a - a'^*)\langle a'|a\rangle = 0. \quad (78)$$

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.

2.2.2 Comutador

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

$$[A, B] := A \circ B - B \circ A. \quad (79)$$

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:

$$[A, A^\dagger] = 0. \quad (80)$$

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

$$[X, Y + Z] = [X, Y] + [X, Z], \quad (81)$$

$$[X + Y, Z] = [X, Z] + [Y, Z], \quad (82)$$

$$[X, Y \circ Z] = Y \circ [X, Z] + [X, Y] \circ Z, \quad (83)$$

$$[X \circ Y, Z] = X \circ [Y, Z] + [X, Z] \circ Y. \quad (84)$$

As matrizes de Pauli são definidas por:

$$\sigma_x \equiv \sigma_1 := \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_y \equiv \sigma_2 := \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_z \equiv \sigma_3 := \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (85)$$

Exercício: Verifique que para as matrizes de Pauli teremos

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{j,k} \sigma_0 + \text{sgn}(j, k, l) i \sigma_l. \quad (86)$$

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

$$[\sigma_j, \sigma_k] = \text{sgn}(j, k, l) 2i \sigma_l. \quad (87)$$

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

$$\{A, B\} := A \circ B + B \circ A. \quad (88)$$

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

$$\{\sigma_j, \sigma_k\} := 0. \quad (89)$$

```
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.,

$$A = \sum_j a_j P_j \text{ e } B = \sum_j b_j P_j \Leftrightarrow [A, B] = \mathcal{H}. \quad (90)$$

2.3.1 Prova

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

$$[A, B] = \left[\sum_j a_j P_j, \sum_k b_k P_k \right] = \sum_{j,k} a_j b_k [P_j, P_k] \quad (91)$$

$$= \sum_{j,k} a_j b_k (P_j \circ P_k - P_k \circ P_j) = \sum_{j,k} a_j b_k (\delta_{j,k} P_j - \delta_{k,j} P_k) \quad (92)$$

$$= \mathcal{H}. \quad (93)$$

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

$$A \circ (B \circ P_j) = (A \circ B) \circ P_j = (B \circ A) \circ P_j = B \circ (A \circ P_j) \quad (94)$$

$$= B \circ (a_j P_j) = a_j (B \circ P_j). \quad (95)$$

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,

$$A(B|a_j^{(k)}\rangle) = (A \circ B)(|a_j^{(k)}\rangle) = (B \circ A)(|a_j^{(k)}\rangle) \quad (96)$$

$$= B(A(|a_j^{(k)}\rangle)) = B(a_j(|a_j^{(k)}\rangle)) \quad (97)$$

$$= a_j(B|a_j^{(k)}\rangle). \quad (98)$$

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 $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ 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) $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ é dito unitário se

$$A^\dagger \circ A = A \circ A^\dagger = \mathbb{I}_{\mathcal{H}}, \quad (99)$$

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

$$(A|v\rangle, A|w\rangle) = (A^\dagger \circ A|v\rangle, |w\rangle) = (\mathbb{I}_{\mathcal{H}}|v\rangle, |w\rangle) \quad (100)$$

$$= (|v\rangle, |w\rangle). \quad (101)$$

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

$$(A|a\rangle, A|a\rangle) = (a|a\rangle, a|a\rangle) = a^*a(|a\rangle, |a\rangle) = |a|^2 \langle a|a\rangle \quad (102)$$

$$(A^\dagger \circ A|a\rangle, |a\rangle) = (\mathbb{I}_{\mathcal{H}}|a\rangle, |a\rangle) = \langle a|a\rangle. \quad (103)$$

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:

$$\langle L_j^A | L_k^A \rangle = |L_j^A\rangle^\dagger |L_k^A\rangle = \begin{bmatrix} A_{j,1}^* & A_{j,2}^* & \cdots & A_{j,d}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{k,1} \\ A_{k,2} \\ \vdots \\ A_{k,d} \end{bmatrix} \quad (104)$$

$$= A_{j,1}^* A_{k,1} + A_{j,2}^* A_{k,2} + \cdots + A_{j,d}^* A_{k,d} = \sum_{l=1}^d A_{k,l} (A^\dagger)_{l,j} \quad (105)$$

$$= (AA^\dagger)_{k,j} = (\mathbb{I}_d)_{k,j} \quad (106)$$

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

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