Universidade Federal de Santa Maria
Centro de Ciências Naturais e Exatas
Programa de Pós-Graduação em Física
Grupo de Teoria da Matéria Condensada

Álgebra Linear

Jonas Maziero

Santa Maria - RS, Maio de 2012

Referências

- M. A. Nielsen e I. L. Chuang, *Quantum Information and Quantum Computation* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000);
- A. F. R. de Toledo Piza, *Mecânica Quântica* (Edusp, São Paulo, 2009).

Sumário $\pm\sigma$

- Espaços Vetoriais;
- Independência Linear e Bases; Produto Interno;
- Procedimento de Gram-Schmidt;
- Desigualdade de Cauchy-Schwarz;
- Operadores Lineares e Matrizes;
- Produto Externo e a Relação de Completeza;
- Autovalores e Autovetores;
- O Adjunto de um Operador;
- Operadores Hermitianos; Projetores;
- Operador Normal; Operador Unitário;
- Produto Tensorial;
- Funções de Operadores;
- Comutadores e Anticomutadores;
- $\cdots$.

Números Complexos

Dados dois números reais $a, b \in \mathbb{R}$ quaisquer, então $z := a + ib \in \mathbb{C}$ é um número complexo, onde $i = \sqrt{-1}$.

- Partes real $\mathrm{Re}z = a \in \mathbb{R}$ e imaginária $\mathrm{Im}z = b \in \mathbb{R}$ do número complexo z;
- Conjugado de um número complexo: $z^* := a - ib \in \mathbb{C}$;
- Dados $z := a + ib \in \mathbb{C}$ e $\tilde{z} := \tilde{a} + i\tilde{b} \in \mathbb{C}$ com $a, b, \tilde{a}, \tilde{b} \in \mathbb{R}$ temos:
  - $z = \tilde{z} \Rightarrow a = \tilde{a}$ e $b = \tilde{b}$;
  - $z \pm \tilde{z} := (a \pm \tilde{a}) + i(b \pm \tilde{b})$;
  - $z\tilde{z} = (a + ib)(\tilde{a} + i\tilde{b}) = a\tilde{a} + ia\tilde{b} + ib\tilde{a} - b\tilde{b}$;
  - $$\frac{z}{\tilde{z}} := \frac{z}{\tilde{z}}\frac{\tilde{z}^*}{\tilde{z}^*} = \frac{z\tilde{z}^*}{\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2}.$$
- Módulo de um número complexo:

$$|z| := \sqrt{zz^*} = \sqrt{a^2 + b^2};$$

Plano Complexo (plano de Argand-Gauss)

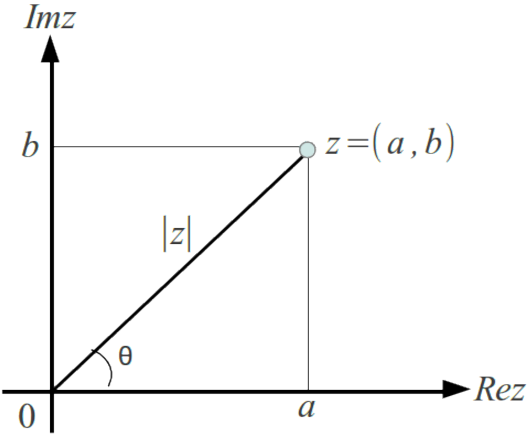
Números complexos podem ser representados como pontos no plano Cartesiano (veja a Figura ao lado). Temos então

$$\cos\theta = \frac{a}{|z|} \text{ e } \sin\theta = \frac{b}{|z|}.$$

Assim

$$\begin{aligned} z &= a + ib \\ &= |z|(\cos\theta + i\sin\theta) \\ &= |z|\exp(i\theta), \end{aligned}$$

com $0 \leq \theta < 2\pi$ e $0 \leq |z| < \infty$.



Também

$$\theta = \arctan(b/a).$$

Álgebra Linear

É o estudo de espaços vetoriais e operações lineares nesses espaços.

- Um Espaço Vetorial é um conjunto de objetos que têm certas propriedades (veja a próxima transparência)
  Exemplo. $\mathbb{C}^n$: conjunto de todas as listas de números complexos ($z_i \in \mathbb{C}$)
  $$(z_1, \cdots, z_n)$$
- Cada objeto (lista) desse conjunto é um vetor.
  Notação matricial (matriz coluna)
  $$|v\rangle = \begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix}$$
  onde $v_i \in \mathbb{C}$
- $|\text{rótulo}\rangle$ é a notação de Dirac para vetores, muito utilizada em Mecânica Quântica.

Propriedades de um Espaço Vetorial ($\mathbb{C}^n$)

1. Existe a operação de adição de objetos.
   Para $|v\rangle = (v_1, \cdots, v_n) \in \mathbb{C}^n$ e $|u\rangle = (u_1, \cdots, u_n) \in \mathbb{C}^n$

$$|v\rangle + |u\rangle := \begin{bmatrix} v_1 + u_1 \\ \vdots \\ v_n + u_n \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^n$$

2. Existe a operação multiplicação por escalar.
   Para $|v\rangle = (v_1, \cdots, v_n) \in \mathbb{C}^n$ e $z \in \mathbb{C}$

$$z \begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} zv_1 \\ \vdots \\ zv_n \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^n$$

3. Existe o elemento nulo $0 := |\oslash\rangle$.

$$|v\rangle + |\oslash\rangle := |v\rangle \; \forall |v\rangle$$

Para $|v\rangle = (v_1, \cdots, v_n) \in \mathbb{C}^n$ e $|\oslash\rangle = (0, \cdots, 0) \in \mathbb{C}^n$

Independência Linear e Bases

Definição. Um conjunto de vetores $\{|v_i\rangle\}$ é linearmente independente (LI) se $\sum_i c_i|v_i\rangle = |\oslash\rangle$ implica em $c_i = 0\ \forall i$.

Definição. Um conjunto de vetores LI $\{|v_i\rangle\}_{i=1}^{\dim V} \in V$ é uma base para um espaço vetorial V se qualquer vetor $|v\rangle \in V$ pode ser escrito como uma combinação linear

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^{\dim V} c_i|v_i\rangle.$$

- Exemplo. Os autoestados de σ^z,

  $$|0\rangle = (1,0);\ |1\rangle = (0,1),$$

  formam uma base para $\mathbb{C}^2$:

  $$|v\rangle = (v_1, v_2) = v_1|0\rangle + v_2|1\rangle.$$

  Existem infinitas outras bases. e.g. os autoestados de σ^x: $|+\rangle = 2^{-1/2}(1,1);\ |-\rangle = 2^{-1/2}(1,-1)$.

Produto interno

Uma função $(\cdot,\cdot) : VxV \to \mathbb{C}$ é um produto interno se satisfaz os seguintes requerimentos

1. É linear no segundo argumento:

$$(|v\rangle, \sum_i c_i |w_i\rangle) = \sum_i c_i (|v\rangle, |w_i\rangle), \text{ onde } c_i \in \mathbb{C};$$

2. $(|v\rangle, |w\rangle) = (|w\rangle, |v\rangle)^*$;
3. $(|v\rangle, |v\rangle) \geq 0$ com igualdade se e somente se $|v\rangle = |\emptyset\rangle$.

Produto interno para $\mathbb{C}^n$:

$$(|v\rangle, |w\rangle) \equiv \langle v|w\rangle := |v\rangle^\dagger |w\rangle = \begin{bmatrix} v_1^* & \cdots & v_n^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix} = \sum_i v_i^* w_i$$

Espaço de Hilbert $\mathcal{H}$:
Espaço vetorial $\mathbb{C}^n$ equipado com um produto interno $(|v\rangle, |w\rangle)$.

Teorema

O produto interno é linear-conjugado no primeiro argumento, i.e., dados $c_i \in \mathbb{C}$ e $|v_i\rangle, |w\rangle \in$ V vem que

$$(\sum_i c_i|v_i\rangle, |w\rangle) = \sum_i c_i^*(|v_i\rangle, |w\rangle).$$

Demonstração

$$\begin{aligned}
(\sum_i c_i|v_i\rangle, |w\rangle) &= (|w\rangle, \sum_i c_i|v_i\rangle)^* \\
&= \left(\sum_i c_i(|w\rangle, |v_i\rangle)\right)^* \\
&= \sum_i c_i^*(|w\rangle, |v_i\rangle)^* \\
&= \sum_i c_i^*(|v_i\rangle, |w\rangle)
\end{aligned}$$

Algumas Definições

- Dois vetores $|v\rangle$ e $|w\rangle$ são ortogonais se seu produto interno é nulo, i.e., se

$$(|v\rangle, |w\rangle) = 0.$$

- A norma ("comprimento") de um vetor $|v\rangle$ é definida como

$$|||v\rangle|| := \sqrt{(|v\rangle, |v\rangle)}$$

- Vetor unitário ou normalizado:

$$|||v\rangle|| = 1.$$

Para $\forall|v\rangle$,se definimos $|\tilde{v}\rangle := \dfrac{|v\rangle}{|||v\rangle||}, -1cm$ então $|||\tilde{v}\rangle|| = 1.$

- Um conjunto de vetores $\{|v_i\rangle\}$ é ortonormal se

$$(|v_i\rangle, |v_j\rangle) = \delta_{ij}.$$

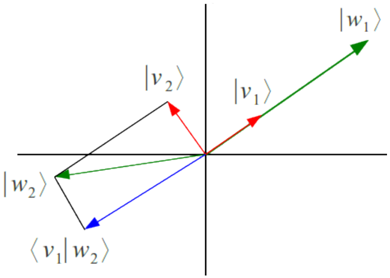
Procedimento de Gram-Schmidt

Dada uma base $\{|w_i\rangle\}_{i=1}^{\dim V} \in V$ de vetores linearmente independentes, obtemos uma base ortonormal $\{|v_i\rangle\}_{i=1}^{\dim V} \in V$ definindo

$$|v_1\rangle := \frac{|w_1\rangle}{|||w_1\rangle||}$$

e, para $1 \leq k \leq \dim V - 1$, definindo

$$|v_{k+1}\rangle := \frac{|w_{k+1}\rangle - \sum_{i=1}^{k}(|v_i\rangle, |w_{k+1}\rangle)|v_i\rangle}{|||w_{k+1}\rangle - \sum_{i=1}^{k}(|v_i\rangle, |w_{k+1}\rangle)|v_i\rangle||}.$$



Desigualdade de Cauchy-Schwarz (DCS)

Teorema. Dados quaisquer dois vetores $|v\rangle, |w\rangle \in \mathcal{H}$, resulta que $|(|v\rangle, |w\rangle)|^2 \leq (|v\rangle, |v\rangle)(|w\rangle, |w\rangle)$

Prova. Partimos do fato que $(|\psi\rangle, |\psi\rangle) \geq 0$ e definimos $|\psi\rangle := |v\rangle + z|w\rangle$, com $z \in \mathbb{C}$. Assim

$$(|\psi\rangle, |\psi\rangle) = (|v\rangle, |v\rangle) + z(|v\rangle, |w\rangle) + z^*(|w\rangle, |v\rangle) + |z|^2(|w\rangle, |w\rangle) \geq 0$$

Agora, se $|w\rangle = |\oslash\rangle$ então $|(|v\rangle, |\oslash\rangle)|^2 = 0 = (|v\rangle, |v\rangle)(|\oslash\rangle, |\oslash\rangle)$ e a DCS é satisfeita. Por outro lado, se $|w\rangle \neq |\oslash\rangle$ definimos

$$z := -(|w\rangle, |v\rangle)/(|w\rangle, |w\rangle)$$

e resulta que

$$\begin{aligned}
(|v\rangle, |v\rangle) - \frac{(|w\rangle, |v\rangle)}{(|w\rangle, |w\rangle)}(|v\rangle, |w\rangle) - \frac{(|w\rangle, |v\rangle)^*}{(|w\rangle, |w\rangle)}(|w\rangle, |v\rangle) + \frac{|(|w\rangle, |v\rangle)|^2}{(|w\rangle, |w\rangle)^2}(|w\rangle, |w\rangle) &\geq 0 \\
(|w\rangle, |w\rangle)(|v\rangle, |v\rangle) - |(|v\rangle, |w\rangle)|^2 - |(|w\rangle, |v\rangle)|^2 + |(|w\rangle, |v\rangle)|^2 \geq 0 & \\
\therefore (|w\rangle, |w\rangle)(|v\rangle, |v\rangle) \geq |(|w\rangle, |v\rangle)|^2 &
\end{aligned}$$

Temos ainda que $(|w\rangle, |w\rangle)(|v\rangle, |v\rangle) = |(|w\rangle, |v\rangle)|^2$ se e somente se $|v\rangle \propto |w\rangle$.

Prova. Assumimos $|v\rangle \propto |w\rangle = c|w\rangle$. Então $(|v\rangle, |v\rangle) = |c|^2(|w\rangle, |w\rangle)$ e $|(|v\rangle, |w\rangle)|^2 = |c|^2(|w\rangle, |w\rangle)^2$, o que implica que $(|v\rangle, |v\rangle)(|w\rangle, |w\rangle) = |(|v\rangle, |w\rangle)|^2$.

Agora assumimos que $(|v\rangle, |v\rangle)(|w\rangle, |w\rangle) = |(|v\rangle, |w\rangle)|^2$ e $|||w\rangle|| \neq 0$. Usamos o procedimento de Gram-Schmidt para construir uma base ortonormal $\{|w_i\rangle\}_{i=1}^{\dim V}$ com $|w_1\rangle := |w\rangle/|||w\rangle||$. Podemos escrever $|v\rangle = \sum_{i=1}^{\dim V} c_i|w_i\rangle$. Assim

$$(|v\rangle, |v\rangle) \quad = \quad (\sum_{i=1}^{\dim V} c_i|w_i\rangle, \sum_{i=1}^{\dim V} c_j|w_j\rangle) = \sum_{i,j=1}^{\dim V} c_i^* c_j \overbrace{(|w_i\rangle, |w_j\rangle)}^{\delta_{ij}} = \sum_{i=1}^{\dim V} |c_i|^2$$

e

$$|(|v\rangle, |w\rangle)|^2 = |(\sum_{i=1}^{\dim V} c_i|w_i\rangle, |||w\rangle|||w_1\rangle)|^2 = |||w\rangle||^2 \sum_{i=1}^{\dim V} |c_i|^2|\overbrace{(|w_i\rangle, |w_1\rangle)}^{\delta_{i1}}|^2 = |||w\rangle||^2|c_1|^2.$$

Com isso vem que

$$|||w\rangle||^2 \left(\sum_{i,j=1}^{\dim V} |c_i|^2 - |c_1|^2 \right) = 0$$

e portanto $c_i = 0$ se $i \neq 1$ e consequentemente $|v\rangle \propto |w\rangle$.

Operadores Lineares

Um operador linear entre espaços vetoriais V e W é qualquer função (mapa) $A : V \to W$ que é linear em seu domínio, i.e.

$$A\left(\sum_i c_i|v_i\rangle\right) = \sum_i c_i A(|v_i\rangle)$$

- Dizemos que um operador linear A está definido em V se $A : V \to V$.

Dois operadores lineares importantes:

- Operador identidade em V:

$$\mathbb{I}_V|v\rangle := |v\rangle \text{ para todo } |v\rangle \in V.$$

- Operador zero em V:

$$0_V|v\rangle := |\emptyset\rangle \text{ para todo } |v\rangle \in V.$$

Matrizes como Operadores Lineares

Uma matriz complexa $\{A_{ij}\}$ é um mapa

$$\{A_{ij}\}_{mxn} : \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^m.$$

Explicitamente ($A_{mxn} v_{1xn} = w_{1xm}$):

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} & A_{m2} & \cdots & A_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix}$$

onde

$$w_i = \sum_{j=1}^{n} A_{ij} v_j$$

Dizer que uma matriz A é um operador linear significa que

$$A\left(\sum_i c_i |v_i\rangle\right) = \sum_i c_i A(|v_i\rangle)$$

Consideremos $A = \{A_{ij}\}$, $|v\rangle = \{v_i\}$ e $|w\rangle = \{w_i\}$. Definimos ainda

$$|x\rangle := a|v\rangle + b|w\rangle = \{x_i\} = \{av_i + bw_i\}.$$

Assim

$$\begin{aligned}
(A|x\rangle)_i &= \sum_j A_{ij} x_j \\
&= \sum_j A_{ij}(av_j + bw_j) \\
&= a\sum_j A_{ij} v_j + b\sum_j A_{ij} w_j \\
&= a(A|v\rangle)_i + b(A|w\rangle)_i.
\end{aligned}$$

Ou seja,

$$\begin{aligned}
A|x\rangle &= A(a|v\rangle + b|w\rangle) \\
&= aA(|v\rangle) + bA(|w\rangle)
\end{aligned}$$

Operadores Lineares como Matrizes

Consideremos um operador linear $A : V \to W$ e bases de vetores $\{|v_i\rangle\}_{i=1}^{m} \in V$ e $\{|w_j\rangle\}_{j=1}^{n} \in W$. Para cada i existem $\{A_{ji}\}_{j=1}^{n} \in \mathbb{C}$ tal que

$$A|v_i\rangle = \sum_{j=1}^{n} A_{ji}|w_j\rangle.$$

A matriz $\{A_{ji}\}_{mxn}$ é uma representação matricial para o operador linear A.

OBS. Para fazer a conexão entre matrizes e operadores lineares devemos especificar as bases de entrada (domínio) e saída (imagem) para o operador linear A e também devemos especificar como A atua na sua base domínio.

Resumindo. Os pontos de vista de operadores lineares e de matrizes são equivalentes.

Matrizes de Pauli. $\sigma^0 := \mathbb{I}$

Vamos considerar $V = W = \mathbb{C}^2$ e uma base (base computacional)

$$|0\rangle := \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, |1\rangle := \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

- Representação matricial para $\mathbb{I} := \sigma^0$:

$$\begin{aligned} \sigma^0|0\rangle &= \sigma^0_{11}|0\rangle + \sigma^0_{21}|1\rangle \\ \sigma^0|1\rangle &= \sigma^0_{12}|0\rangle + \sigma^0_{22}|1\rangle \end{aligned}$$

Ação de σ^0:

$$\sigma^0|0\rangle = |0\rangle \text{ e } \sigma^0|1\rangle = |1\rangle.$$

Ou seja

$$\sigma^0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

- Representação matricial para $\sigma^x := \sigma^1 := X$:

$$\begin{aligned}\sigma^1|0\rangle &= \sigma^1_{11}|0\rangle + \sigma^1_{21}|1\rangle \\ \sigma^1|1\rangle &= \sigma^1_{12}|0\rangle + \sigma^1_{22}|1\rangle\end{aligned}$$

Ação de σ^1 (porta lógica NOT da computação clássica e quântica):

$$\sigma^1|0\rangle = |1\rangle \text{ e } \sigma^1|1\rangle = |0\rangle.$$

Ou seja

$$\sigma^1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix},$$

que tem autovalores ± 1 e autovetores

$$\begin{aligned}|\uparrow_x\rangle &= 2^{-1/2}(|0\rangle + |1\rangle) \\ |\downarrow_x\rangle &= 2^{-1/2}(|0\rangle - |1\rangle)\end{aligned}$$

- Representação matricial para $\sigma^y := \sigma^2 := Y$:

$$\begin{aligned} \sigma^2|0\rangle &= \sigma^2_{11}|0\rangle + \sigma^2_{21}|1\rangle \\ \sigma^2|1\rangle &= \sigma^2_{12}|0\rangle + \sigma^2_{22}|1\rangle \end{aligned}$$

Ação de σ^2:

$$\sigma^2|0\rangle = \exp(i\pi/2)|1\rangle \text{ e } \sigma^2|1\rangle = \exp(-i\pi/2)|0\rangle.$$

Ou seja[1]

$$\sigma^2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix},$$

com $i = \sqrt{-1}$. Temos que σ^2 tem autovalores ± 1 e autovetores

$$\begin{aligned} |\uparrow_y\rangle &= 2^{-1/2}(|0\rangle + i|1\rangle) \\ |\downarrow_y\rangle &= 2^{-1/2}(|0\rangle - i|1\rangle) \end{aligned}$$

[1] Relação de Euler: $\exp(i\theta) = \cos(\theta) + i\sin(\theta)$

- Representação matricial para $\sigma^z := \sigma^3 := Z$:

$$\begin{aligned} \sigma^3|0\rangle &= \sigma^3_{11}|0\rangle + \sigma^3_{21}|1\rangle \\ \sigma^3|1\rangle &= \sigma^3_{12}|0\rangle + \sigma^3_{22}|1\rangle \end{aligned}$$

Ação de σ^3:

$$\sigma^3|0\rangle = |0\rangle \text{ e } \sigma^3|1\rangle = \exp(i\pi)|1\rangle.$$

Ou seja

$$\sigma^3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$

com $i = \sqrt{-1}$. Temos que σ^2 tem autovalores ± 1 e autovetores

$$\begin{aligned} |\uparrow_z\rangle &= |0\rangle \\ |\downarrow_z\rangle &= |1\rangle \end{aligned}$$

Representação Matricial para Operadores Compostos

Consideremos operadores lineares $A : V \to W$ e $B : W \to X$ e bases $\{|v_i\rangle\} \in V$, $\{|w_j\rangle\} \in W$ e $\{|x_k\rangle\} \in X$. Questão. Qual a representação matricial para a transformação linear $B(A(\cdot)) = B \circ A(\cdot)$?

Temos que

$$A(|v_i\rangle) = \sum_j A_{ji}|w_j\rangle$$

Então

$$\begin{aligned} B(A(|v_i\rangle) &= \sum_j A_{ji}B(|w_j\rangle) \\ &= \sum_j A_{ji}\sum_k B_{kj}|x_k\rangle \\ &= \sum_k\sum_j B_{kj}A_{ji}|x_k\rangle \\ &= \sum_k (BA)_{ki}|x_k\rangle \end{aligned}$$

Produto Externo. Consideremos $|v\rangle, |\tilde{v}\rangle \in V$ e $|w\rangle \in W$. O operador linear produto externo $|w\rangle\langle v| : V \to W$ é definido como

$$|w\rangle\langle v|(|\tilde{v}\rangle) = |w\rangle(|v\rangle, |\tilde{v}\rangle) = (|v\rangle, |\tilde{v}\rangle)|w\rangle$$

Assim, para $\{|v_i\rangle\}, |\tilde{v}\rangle \in V$ e $\{|w_i\rangle\} \in W$, a combinação linear $\sum_i a_i|w_i\rangle\langle v_i|$ é um operador linear que atua da seguinte forma

$$\sum_i a_i|w_i\rangle\langle v_i|(|\tilde{v}\rangle) = \sum_i a_i(|v_i\rangle, |\tilde{v}\rangle)|w_i\rangle.$$

Relação de Completeza. Consideremos uma base ortonormal $\{|j\rangle\}_{j=1}^{\dim V} \in V$. Qualquer vetor $|v\rangle \in V$ pode ser escrito como $|v\rangle = \sum_j v_j|j\rangle$, com $v_j = (|j\rangle, |v\rangle) \in \mathbb{C}$. Assim vem que

$$\sum_{j=1}^{\dim V} |j\rangle\langle j|(|v\rangle) = \sum_{j=1}^{\dim V} |j\rangle(|j\rangle, |v\rangle) = \sum_{j=1}^{\dim V} v_j|j\rangle = |v\rangle,$$

ou seja

$$\sum_{j=1}^{\dim V} |j\rangle\langle j| = \mathbb{I}_V.$$

Outra Demonstração da Desigualdade de Cauchy-Schwarz

Teorema. Dados quaisquer dois vetores $|v\rangle, |w\rangle \in \mathcal{H}$, resulta que

$$|(|v\rangle, |w\rangle)|^2 \leq (|v\rangle, |v\rangle)(|w\rangle, |w\rangle)$$

Prova. Usamos o procedimento de Gram-Schmidt para construir uma base ortonormal $\{|j\rangle\}$ e definimos

$$|1\rangle := \frac{|w\rangle}{|||w\rangle||}.$$

Utilizando a relação de completeza $\sum_j |j\rangle\langle j| = \mathbb{I}$ escrevemos

$$\begin{aligned}
(|v\rangle, |v\rangle)(|w\rangle, |w\rangle) &= (|v\rangle, \mathbb{I}(|v\rangle))(|w\rangle, |w\rangle) = (|v\rangle, \sum_j |j\rangle\langle j|(|v\rangle))(|w\rangle, |w\rangle) \\
&= (|v\rangle, \sum_j |j\rangle(|j\rangle, |v\rangle))(|w\rangle, |w\rangle) \\
&= \sum_j (|j\rangle, |v\rangle)(|v\rangle, |j\rangle)(|w\rangle, |w\rangle) = \sum_j |(|v\rangle, |j\rangle)|^2(|w\rangle, |w\rangle) \\
&\geq |(|v\rangle, |1\rangle)|^2(|w\rangle, |w\rangle) \\
&:= \frac{|(|v\rangle, |w\rangle)|^2}{|||w\rangle||^2}(|w\rangle, |w\rangle) \\
&= |(|v\rangle, |w\rangle)|^2
\end{aligned}$$

Consideremos $A : V \to W$ e bases ortonormais $\{|v_i\rangle\}_{i=1}^{\dim V} \in V$ e $\{|w_j\rangle\}_{j=1}^{\dim W} \in W$.

Representação de A na forma produto externo

$$\begin{aligned} A &= \mathbb{I}_W A \mathbb{I}_V \\ &= \left(\sum_{j=1}^{\dim W} |w_j\rangle\langle w_j|\right) A \left(\sum_{i=1}^{\dim V} |v_i\rangle\langle v_i|\right) \\ &= \sum_{j=1}^{\dim W} \sum_{i=1}^{\dim V} (|w_j\rangle, A|v_i\rangle)|w_j\rangle\langle v_i| \end{aligned}$$

Representação matricial de A

$$A_{ji} := (|w_j\rangle, A|v_i\rangle)$$

são os elementos na linha j e coluna i.

Exemplo. Matriz de Pauli σ^x

$$\sigma^x = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|.$$

Os autovetores de um operador linear A são vetores não nulos $|v\rangle \in V$ tais que

$$A|v\rangle = v|v\rangle,$$

e $v \in \mathbb{C}$ são os autovalores de A.

Autovalores (equação característica):
$(A - v\mathbb{I})|v\rangle = |\oslash\rangle \therefore (A - v\mathbb{I})^{-1}(A - v\mathbb{I})|v\rangle = |\oslash\rangle \therefore |v\rangle = |\oslash\rangle$. Portanto

$$\det(A - \lambda\mathbb{I}) = 0$$

Autovetores

$$(A - \lambda\mathbb{I})|v\rangle = |\oslash\rangle$$

Representação diagonal (decomposição ortonormal) de A em V:

$$A = \sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i|,$$

onde $\{|i\rangle\}_{i=1}^{\dim V}$ é uma base ortonormal para V.

Degenerescência. Um autovalor tem dois ou mais autovetores correspondentes.

Adjunto de um Operador

Dado um operador linear $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, existe um único operador linear $A^\dagger$ tal que, para todo $|v\rangle, |w\rangle \in \mathcal{H}$,

$$(|v\rangle, A|w\rangle) = (A^\dagger|v\rangle, |w\rangle).$$

$A^\dagger$ é conhecido com o **adjunto** (ou Hermitiano conjugado) de A.

Alguns resultados e definições:

- $\left(A^\dagger\right)^\dagger = A$;

  $$(A|v\rangle, |w\rangle) = (|w\rangle, A|v\rangle)^* = (A^\dagger|w\rangle, |v\rangle)^* = (|v\rangle, A^\dagger|w\rangle) = ((A^\dagger)^\dagger|v\rangle, |w\rangle)$$

- $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$

  $$(|v\rangle, AB|w\rangle) = (A^\dagger|v\rangle, B|w\rangle) = (B^\dagger A^\dagger|v\rangle, |w\rangle) = ((AB)^\dagger|v\rangle, |w\rangle);$$

- Dado um vetor $|v\rangle$ define-se $\langle v| := |v\rangle^\dagger$. Então $(A|v\rangle)^\dagger = \langle v|A^\dagger$;
- $(|v\rangle\langle w|)^\dagger = |w\rangle\langle v|$;

- $(\sum_i a_i A_i)^\dagger = \sum_i a_i^* A_i^\dagger$

Prova. Dados $a_i \in \mathbb{C}$, $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ e $|v\rangle, |w\rangle \in \mathcal{H}$, temos que

$$\begin{aligned}
(|v\rangle, \sum_i a_i A_i |w\rangle) &= \sum_i a_i (|v\rangle, A_i |w\rangle); \text{ ((·,·) é linear no 2º argumento)} \\
&= \sum_i a_i (A_i^\dagger |v\rangle, |w\rangle) \\
&= (\sum_i a_i^* A_i^\dagger |v\rangle, |w\rangle); \text{ ((·,·) é anti-linear no 1º argumento)} \\
&= ((\sum_i a_i A_i)^\dagger |v\rangle, |w\rangle)
\end{aligned}$$

- $A^\dagger = (A^T)^* = (A^*)^T$. Ex.

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \ddots \end{bmatrix} \Rightarrow A^\dagger = \begin{bmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* & \cdots \\ a_{12}^* & a_{22}^* & \cdots \\ \cdots & \cdots & \ddots \end{bmatrix}$$

Operadores Hermitianos

Um operador é dito **Hermitiano** (ou auto-adjunto) se

$$A^\dagger = A$$

- Operadores Hermitianos tem autovalores reais ($A|a\rangle = a|a\rangle$)

$$\begin{aligned}(|a\rangle, A|a\rangle) &= (|a\rangle, a|a\rangle) = a(|a\rangle, |a\rangle) = a \\ &= (A^\dagger|a\rangle, |a\rangle) = (A|a\rangle, |a\rangle) = (a|a\rangle, |a\rangle) \\ &= a^*(|a\rangle, |a\rangle) = a^*\end{aligned}$$

  Portanto $a = a^* \Rightarrow a \in \mathbb{R}$.
- Os autovetores de um operador Hermitiano correspondentes a autovetores diferentes são ortogonais. Consideremos $A|a\rangle = a|a\rangle$ e $A|b\rangle = b|b\rangle$ com $a \neq b$.

$$\begin{aligned}(|a\rangle, A|b\rangle) &= (|a\rangle, b|b\rangle) = b(|a\rangle, |b\rangle) \\ &= (A^\dagger|a\rangle, |b\rangle) = (A|a\rangle, |b\rangle) = a(|a\rangle, |b\rangle)\end{aligned}$$

  Portanto $(a-b)(|a\rangle, |b\rangle) = 0 \Rightarrow (|a\rangle, |b\rangle) = 0$.

Projetores

Consideremos uma base $\{|j\rangle\}_{j=1}^{\dim W} \in W$, sendo W um subespaço do espaço vetorial V. Assim, podemos construir uma base $\{|j\rangle\}_{j=1}^{\dim V} \in V$ com $\dim V \geq \dim W$. Por definição

$$P := \sum_{j=1}^{\dim W} |j\rangle\langle j|$$

é um **projetor no subespaço W.**

- $P^\dagger = P$; ($P|p\rangle = p|p\rangle$ com $p \in \mathbb{R}$)
- $P^2 = P$; ($P|p\rangle = P^2|p\rangle = p^2|p\rangle \Rightarrow p^2 = p \Rightarrow p = 0, 1$)
- $P + Q = \mathbb{I}_V$ com

$$Q = \sum_{j=\dim W+1}^{\dim V} |j\rangle\langle j|$$

sendo o **complemento ortonormal de P.**

Operador Normal

Um operador A é dito **normal** se

$$AA^\dagger = A^\dagger A.$$

Se um operador A é Hermitiano ($A^\dagger = A$) então A é normal ($A^\dagger A = AA$).

Teorema (Decomposição Espectral). Dado $A : V \to V$, resulta que A é normal se e somente se existir uma base ortonormal de V na qual A é diagonal.

Prova. Iniciamos assumindo que existe uma base ortonormal $\{|a_i\rangle\}$ na qual A é diagonal, i.e., $A = \sum_i a_i |a_i\rangle\langle a_i|$. Segue então que

$$\begin{aligned}
AA^\dagger &= \Big(\sum_i a_i|a_i\rangle\langle a_i|\Big)\Big(\sum_j a_j|a_j\rangle\langle a_j|\Big)^\dagger = \sum_i\sum_j a_i a_j^* |a_i\rangle \overbrace{(|a_i\rangle, |a_j\rangle)}^{\delta_{ij}} \langle a_j| \\
&= \sum_i a_i^* a_i |a_i\rangle\langle a_i| = \sum_j\sum_i a_j^* a_i |a_j\rangle(|a_j\rangle, |a_i\rangle)\langle a_i| \\
&= \Big(\sum_j a_j|a_j\rangle\langle a_j|\Big)^\dagger\Big(\sum_i a_i|a_i\rangle\langle a_i|\Big) = A^\dagger A
\end{aligned}$$

Agora assumimos que A é normal, i.e., $AA^\dagger = A^\dagger A$.

Seja a_i um autovetor de A e P o projetor no auto-espaço de a_i (V_i) e seja Q o projetor no complemento ortonormal de P, ou seja, $P + Q = \mathbb{I}_V$. Assim

$$
\begin{aligned}
A &= \mathbb{I}_V A \mathbb{I}_V = (P+Q)A(P+Q) \\
&= \underbrace{PAP}_{=a_i P} + PAQ + \underbrace{QAP}_{=a_i QP = 0} + QAQ
\end{aligned}
$$

Como A é normal, dado um vetor $|v\rangle \in V_i$, vem que

$$
AA^\dagger|v\rangle = A^\dagger A|v\rangle = a_i A^\dagger|v\rangle.
$$

Ou seja, $A^\dagger|v\rangle$ é um elemento de V_i. Então

$$
(PAQ)^\dagger = Q^\dagger A^\dagger P^\dagger = Q\underbrace{A^\dagger P}_{\in V_i} = 0 \Rightarrow ((PAQ)^\dagger)^\dagger = PAQ = 0
$$

Portanto

$$A = PAP + QAQ.$$

Lembrando $A : V \to V$. Assim, dada uma base $\{|v_j\rangle\}_{j=1}^{\dim V} \in V$, podemos escrever

$$A = \sum_{j,k=1}^{\dim V} A_{jk} |v_j\rangle\langle v_k|$$

com

$$A_{jk} := (|v_j\rangle, A|v_k\rangle).$$

- Percebe-se por conseguinte que PAP e QAQ são diagonais com relação a uma base ortonormal do subespaço P e Q, respectivamente.
- Portanto A é diagonal em uma base do espaço total V, completando assim a prova.

Operadores Positivos

Um operador A é dito positivo (notação $A \geq 0$) se

$$(|v\rangle, A|v\rangle) \geq 0 \ \forall |v\rangle.$$

Se $(|v\rangle, A|v\rangle) > 0 \ \forall |v\rangle \neq |\emptyset\rangle$, então A é dito positivo definido.

Um operador positivo ($A \geq 0$) é necessariamente Hermitiano ($A = A^\dagger$).

$A^\dagger A$ é positivo ($A^\dagger A \geq 0$) para qualquer operador linear A.

Prova. Definindo $A|v\rangle := |w\rangle$ temos

$$(|v\rangle, A^\dagger A|v\rangle) = (A|v\rangle, A|v\rangle) = (|w\rangle, |w\rangle) \geq 0.$$

Operador Unitário

Um operador U é dito unitário se

$$U^\dagger U = \mathbb{I} = UU^\dagger$$

- Operadores unitários preservam o produto interno:

$$(U|v\rangle, U|w\rangle) = (U^\dagger U|v\rangle, |w\rangle) = (\mathbb{I}|v\rangle, |w\rangle) = (|v\rangle, |w\rangle).$$

- Os autovalores de um operador unitário ($U|u\rangle = u|u\rangle$) tem módulo $|u| = 1$ e portanto podem ser escritos de maneira geral como $u = \exp(i\theta)$, com $\theta \in \mathbb{R}$.

$$\begin{aligned}
(|u\rangle, |u\rangle) &= 1 \\
&= (U|u\rangle, U|u\rangle) = (u|u\rangle, u|u\rangle) = |u|^2\langle u|u\rangle = |u|^2 \\
&\Rightarrow |u| = 1 \\
&\Rightarrow u = |u|\exp(i\theta) = \exp(i\theta)
\end{aligned}$$

- O vetores $|r_i\rangle = (u_{i1}, u_{i2}, u_{i3}, \cdots)$ das linhas de U formam um conjunto ortonormal, i.e.,

$$(|r_i\rangle, |r_j\rangle) = \sum_k u_{ik} u^*_{jk} = \delta_{ij}$$

$$UU^\dagger = \mathbb{I} \therefore \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} & \cdots \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^*_{11} & u^*_{21} & u^*_{31} & \cdots \\ u^*_{12} & u^*_{22} & u^*_{32} & \cdots \\ u^*_{13} & u^*_{23} & u^*_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

- O vetores $|c_i\rangle = (u_{1i}, u_{2i}, u_{3i}, \cdots)$ das colunas de U formam um conjunto ortonormal, i.e.,

$$(|c_i\rangle, |c_j\rangle) = \sum_k u_{ki} u^*_{kj} = \delta_{ij}$$

$$U^\dagger U = \mathbb{I} \therefore \begin{bmatrix} u^*_{11} & u^*_{21} & u^*_{31} & \cdots \\ u^*_{12} & u^*_{22} & u^*_{32} & \cdots \\ u^*_{13} & u^*_{23} & u^*_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} & \cdots \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

Operador Unitário. Representação Produto Externo

Consideremos uma base ortonormal $\{|v_i\rangle\}$ ($(|v_i\rangle, |v_j\rangle) = \delta_{ij}$). Assim $\{|w_i\rangle\} := \{U|v_i\rangle\}$ também forma uma base ortonormal:

$$(|w_i\rangle, |w_j\rangle) = (U|v_i\rangle, U|v_j\rangle) = (U^\dagger U|v_i\rangle, |v_j\rangle) = (|v_i\rangle, |v_j\rangle) = \delta_{ij}$$

Portanto

$$U = \sum_i |w_i\rangle\langle v_i|$$

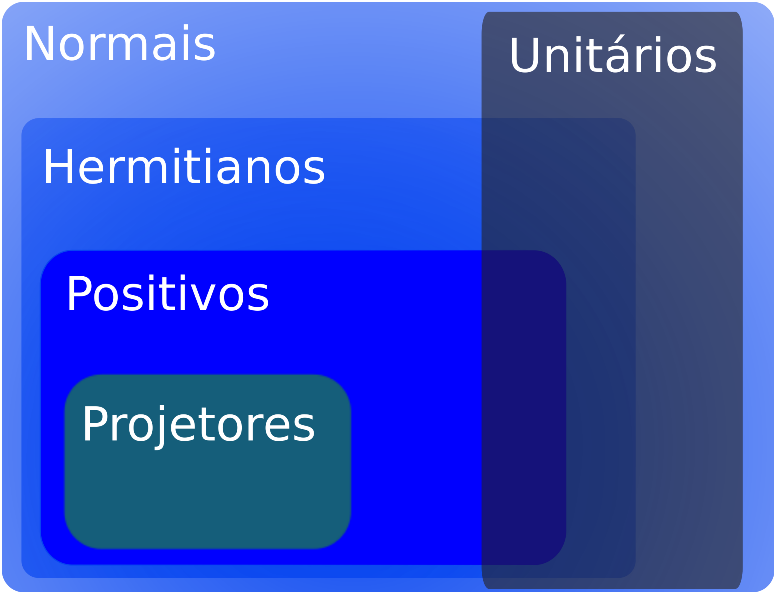
Matrizes de Pauli

$$\begin{aligned}
\sigma^0 &= |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| \\
\sigma^1 &= |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| \\
\sigma^2 &= -i|0\rangle\langle 1| + i|1\rangle\langle 0| \\
\sigma^3 &= |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|
\end{aligned}$$

são Hermitianas e unitárias

$$\begin{aligned}
\left(\sigma^i\right)^\dagger &= \sigma^i,\ i = 0, 1, 2, 3 \\
\left(\sigma^i\right)^2 &= \sigma^0
\end{aligned}$$

Relações entre os Diferentes Tipos de Operadores



Produto Tensorial

O produto tensorial é utilizado para tratar espaços vetoriais utilizados na descrição de **sistemas de muitos corpos** a partir dos espaços vetoriais de suas partes constituintes.

Consideremos dois espaços de Hilbert $\mathcal{H}^a$ e $\mathcal{H}^b$ e bases ortonormais

$$\{|i^a\rangle\} \in \mathcal{H}^a \text{ e } \{|j^b\rangle\} \in \mathcal{H}^b$$

com $i = 1, \cdots, \dim\mathcal{H}^a$ e $j = 1, \cdots, \dim\mathcal{H}^b$. Uma base ortonormal para o espaço produto tensorial $\mathcal{H}^a \otimes \mathcal{H}^b$ é definida como

$$\{|i^a\rangle \otimes |j^b\rangle\}.$$

Temos assim que $\dim\mathcal{H}^a \otimes \mathcal{H}^b = \dim\mathcal{H}^a \dim\mathcal{H}^b$.

- Qualquer vetor $|\psi^{ab}\rangle \in \mathcal{H}^a \otimes \mathcal{H}^b$ pode ser escrito como

$$|\psi^{ab}\rangle = \sum_{i,j} c_{i,j} |i^a\rangle \otimes |j^b\rangle,$$

com $c_{i,j} \in \mathbb{C}$.

- Convenção

$$|i^a\rangle \otimes |j^b\rangle \equiv |i^a\rangle|j^b\rangle \equiv |i^a, j^b\rangle \equiv |i^a j^b\rangle \equiv |ij\rangle.$$

Propriedades do Produto Tensorial

1. Para $z \in \mathbb{C}$ e $|\psi^a\rangle \in \mathcal{H}^a$ e $|\phi^b\rangle \in \mathcal{H}^b$

$$z(|\psi^a\rangle \otimes |\phi^b\rangle) = (z|\psi^a\rangle) \otimes |\phi^b\rangle = |\psi^a\rangle \otimes (z|\phi^b\rangle)$$

2. Para $|\psi^a\rangle, |\xi^a\rangle \in \mathcal{H}^a$ e $|\phi^b\rangle \in \mathcal{H}^b$

$$(|\psi^a\rangle + |\xi^a\rangle) \otimes |\phi^b\rangle = |\psi^a\rangle \otimes |\phi^b\rangle + |\xi^a\rangle \otimes |\phi^b\rangle$$

3. Para $|\psi^a\rangle \in \mathcal{H}^a$ e $|\phi^b\rangle, |\chi^b\rangle \in \mathcal{H}^b$

$$|\psi^a\rangle \otimes (|\phi^b\rangle + |\chi^b\rangle) = |\psi^a\rangle \otimes |\phi^b\rangle + |\psi^a\rangle \otimes |\chi^b\rangle$$

Operadores Lineares em $\mathcal{H}^a \otimes \mathcal{H}^b$

Consideremos vetores $|\psi^a\rangle \in \mathcal{H}^a$ e $|\phi^b\rangle \in \mathcal{H}^b$ e operadores lineares $A : \mathcal{H}^a \to \tilde{\mathcal{H}}^a$ e $B : \mathcal{H}^b \to \tilde{\mathcal{H}}^b$. Define-se um operador linear $A \otimes B : \mathcal{H}^a \otimes \mathcal{H}^b \to \tilde{\mathcal{H}}^a \otimes \tilde{\mathcal{H}}^b$ como

$$A \otimes B(|\psi^a\rangle \otimes |\phi^b\rangle) := A(|\psi^a\rangle) \otimes B(|\phi^b\rangle)$$

- Linearidade de $A \otimes B$

$$A \otimes B(|\Psi^{ab}\rangle) = A \otimes B(\sum_{i,j} c_{i,j} |i^a\rangle \otimes |j^b\rangle) = \sum_{i,j} c_{i,j} A(|i^a\rangle) \otimes B(|j^b\rangle)$$

- Para $A_j : \mathcal{H}^a \to \tilde{\mathcal{H}}^a$ e $B_j : \mathcal{H}^b \to \tilde{\mathcal{H}}^b$, um operador linear $C^{ab} : \mathcal{H}^a \otimes \mathcal{H}^b \to \tilde{\mathcal{H}}^a \otimes \tilde{\mathcal{H}}^b$ pode ser representado de maneira geral como

$$C^{ab} = \sum_{i,j} c_{i,j} A_i \otimes B_j, \text{ com } c_{i,j} \in \mathbb{C}.$$

- Por definição

$$(\sum_{i,j} c_{i,j} A_i \otimes B_j)(|\psi^a\rangle \otimes |\phi^b\rangle) := \sum_{i,j} c_{i,j} A_i(|\psi^a\rangle) \otimes B_j(|\phi^b\rangle).$$

Produto interno e Produto de Kronecker

Produto interno para espaços produto tensorial

$$
\begin{aligned}
(|\psi^{ab}\rangle, |\phi^{ab}\rangle) &= (\sum_{j,k} c_{j,k}|j^a\rangle \otimes |k^b\rangle, \sum_{m,n} d_{m,n}|m^a\rangle \otimes |n^b\rangle) \\
&:= |\psi^{ab}\rangle^\dagger |\phi^{ab}\rangle = \sum_{j,k} c^*_{j,k} d_{j,k}.
\end{aligned}
$$

Dadas matrizes $\{A_{i,j}\}_{mxn}$ e $\{B_{k,l}\}_{p,q}$ o **produto de Kronecker** é definido como

$$
A \otimes B := mxp \text{ linhas} \left\{ \overbrace{\begin{bmatrix} A_{11}B & A_{12}B & \cdots & A_{1n}B \\ A_{21}B & A_{22}B & \cdots & A_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1}B & A_{m2}B & \cdots & A_{mn}B \end{bmatrix}}^{nxq \text{ colunas}} \right.
$$

Notação: $A^{\otimes n} := \overbrace{A \otimes \cdots \otimes A}^{n\text{vezes}}$. Exemplo. $A^{\otimes 2} = A \otimes A$.

Funções de Operadores

Dado um operador normal A com decomposição espectral

$$A = \sum_a a|a\rangle\langle a|,$$

uma função $f : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ desse operador é definida como

$$f(A) := \sum_a f(a)|a\rangle\langle a|.$$

Exemplo.

$$\exp(\theta\sigma^1) = \exp(\theta)|\uparrow_x\rangle\langle\uparrow_x| + \exp(-\theta)|\downarrow_x\rangle\langle\downarrow_x|$$

Dados $\vec{n} \in \mathbb{R}^3$ com $||\vec{n}|| = 1$, $\theta \in \mathbb{R}$ e $\vec{\sigma} = (\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3)$, segue que

$$\exp(i\theta\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) = \cos(\theta)\mathbb{I} + i\sin(\theta)\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$$

Prova. Vamos utilizar as séries de Taylor,

$$f(x)|_{x_0} = \sum_{n=0}^{\infty} \left.\frac{d^n f(x)}{dx^n}\right|_{x_0} \frac{(x - x_0)^n}{n!},$$

para

$$\exp(x)|_0 = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} + \cdots$$

$$\begin{aligned} \cos(x)|_0 &= 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \cdots \\ \sin(x)|_0 &= x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots \end{aligned}$$

Mostremos que $(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^2 = \mathbb{I}$.

$$\begin{aligned}
(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^2 &= (n_1\sigma^1 + n_2\sigma^2 + n_3\sigma^3)(n_1\sigma^1 + n_2\sigma^2 + n_3\sigma^3) \\
&= n_1^2(\sigma^1)^2 + n_1 n_2\sigma^1\sigma^2 + n_1 n_3\sigma^1\sigma^3 \\
&\quad + n_1 n_2\sigma^2\sigma^1 + n_2^2(\sigma^2)^2 + n_2 n_3\sigma^2\sigma^3 \\
&\quad + n_1 n_3\sigma^3\sigma^1 + n_2 n_3\sigma^3\sigma^2 + n_3^2(\sigma^3)^2 \\
&= (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)\mathbb{I} \\
&= \mathbb{I}
\end{aligned}$$

Assim obtemos

$$\begin{aligned}
\exp(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma}) &= \mathbb{I} + (i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma}) + \frac{(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^2}{2} + \frac{(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^3}{3!} + \frac{(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^4}{4!} \\
&\quad + \frac{(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^5}{5!} + \cdots \\
&= \mathbb{I} + i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma} - \frac{\theta^2}{2}\mathbb{I} - i\frac{\theta^3}{3!}\vec{n}\cdot\vec{\sigma} + \frac{\theta^4}{4!}\mathbb{I} + i\frac{\theta^5}{5!}\vec{n}\cdot\vec{\sigma} + \cdots \\
&= (1 - \frac{\theta^2}{2} + \frac{\theta^4}{4!} - \cdots)\mathbb{I} + i(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} - \cdots)\vec{n}\cdot\vec{\sigma} \\
&= \cos(\theta)\mathbb{I} + i\sin(\theta)\vec{n}\cdot\vec{\sigma}
\end{aligned}$$

A Função Traço

O traço de um operador A, numa certa representação matricial, é definido como

$$\mathrm{tr}(A) := \sum_j A_{jj}$$

Propriedades da função traço

- $\mathrm{tr}(AB) = \mathrm{tr}(BA)$ (cíclico);

  Prova. $$\begin{aligned} \mathrm{tr}(AB) &= \sum_i (AB)_{ii} = \sum_i \sum_j A_{ij} B_{ji} = \sum_j \sum_i B_{ji} A_{ij} \\ &= \sum_j (BA)_{jj} = \mathrm{tr}(BA) \end{aligned}$$

- $\mathrm{tr}(A+B) = \mathrm{tr}(A) + \mathrm{tr}(B)$ (linear);
- $\mathrm{tr}(zA) = z\mathrm{tr}(A)$ com $z \in \mathbb{C}$.
- $\mathrm{tr}(UAU^\dagger) = \mathrm{tr}(U^\dagger UA) = \mathrm{tr}(A)$ (o **traço não depende da base** utilizada na representação matricial de A);
- $\mathrm{tr}(A \otimes B) = (\mathrm{tr}A)(\mathrm{tr}B)$.

A Função Traço Parcial

Consideremos um operador linear $C^{ab} : \mathcal{H}^a \otimes \mathcal{H}^b \rightarrow \mathcal{H}^a \otimes \mathcal{H}^b$ na sua representação produto externo

$$
\begin{aligned}
C^{ab} &= \mathbb{I}^a \otimes \mathbb{I}^b C^{ab} \mathbb{I}^a \otimes \mathbb{I}^b \\
&= (\sum_i |i^a\rangle\langle i^a|) \otimes (\sum_j |j^b\rangle\langle j^b|) C^{ab} (\sum_k |k^a\rangle\langle k^a|) \otimes (\sum_l |l^b\rangle\langle l^b|) \\
&= \sum_{i,j,k,l} (|i^a\rangle\langle i^a| \otimes |j^b\rangle\langle j^b|) C^{ab} (|k^a\rangle\langle k^a| \otimes |l^b\rangle\langle l^b|) \\
&= \sum_{i,j,k,l} |i^a\rangle \otimes |j^b\rangle (\langle i^a| \otimes \langle j^b| C^{ab} |k^a\rangle \otimes |l^b\rangle) \langle k^a| \otimes \langle l^b| \\
&= \sum_{i,j,k,l} (\langle i^a| \otimes \langle j^b| C^{ab} |k^a\rangle \otimes |l^b\rangle) |i^a\rangle \otimes |j^b\rangle \langle k^a| \otimes \langle l^b| \\
&:= \sum_{i,j,k,l} C^{ab}_{ij,kl} |i^a\rangle\langle k^a| \otimes |j^b\rangle\langle l^b|
\end{aligned}
$$

Um operador linear reduzido $C^a : \mathcal{H}^a \to \mathcal{H}^a$ pode ser obtido através da operação de traço parcial sobre $\mathcal{H}^b$ (notação tr_b), que é definida como

$$\begin{aligned} C^a &= \mathrm{tr}_b C^{ab} \\ &:= \sum_m \langle m^b | C^{ab} | m^b \rangle \\ &\equiv \sum_{i,k} \sum_m C^{ab}_{im,km} | i^a \rangle \langle k^a | \\ &= \sum_{i,k} C^a_{i,k} | i^a \rangle \langle k^a |, \end{aligned}$$

com

$$C^a_{i,k} := \sum_m C^{ab}_{im,km}$$

Espaço de Operadores Lineares e o Produto Interno de Hilbert-Schmidt

O espaço formado por operador lineares $L(\mathcal{H}) : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ também é um espaço de Hilbert com produto interno definido como

$$(A, B) := \mathrm{tr}(A^\dagger B).$$

$L(\mathcal{H}) : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ é uma espaço vetorial. Dados dois operadores lineares $A, B : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ e $\{|v_i\rangle\} \in \mathcal{H}$, temos

1. $(A+B)(\sum_i c_i|v_i\rangle) = A(\sum_i c_i|v_i\rangle)+B(\sum_i c_i|v_i\rangle) = \sum_i c_i(A+B)(|v_i\rangle)$;
2. $(zA)(\sum_i c_i|v_i\rangle) = z\sum_i c_i A(|v_i\rangle)$;
3. $A + o_{\mathcal{H}} = A$ com $o_{\mathcal{H}}|v_i\rangle = |\oslash\rangle$.

$\mathrm{tr}(A^\dagger B)$ é um produto interno. Dados $A, B : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ e $b_i \in \mathbb{C}$, temos

1. $(A, \sum_j b_j B_j) = \mathrm{tr}(A^\dagger \sum_j b_j B_j) = \sum_j b_j \mathrm{tr}(A^\dagger B_j) = \sum_j b_j (A, B_j)$;
2. $(A, B) = \mathrm{tr}(A^\dagger B) = \mathrm{tr}(\sum_i A^*_{ji} B_{ik}) = \sum_j \sum_i A^*_{ji} B_{ij} =$ $(\sum_i \sum_j B^*_{ij} A_{ji})^* = (\mathrm{tr}(B^\dagger A))^* = (B, A)^*$;
3. $(A, A) = \mathrm{tr}(A^\dagger A) \geq 0$.

Comutadores e Anticomutadores

O **comutador** entre dois operadores A e B é definido como

$$[A, B] \equiv [A, B]_- := AB - BA.$$

Se $AB = BA$ dizemos que A e B comutam.

O **anti-comutador** entre dois operadores A e B é definido como

$$\{A, B\} \equiv [A, B]_+ := AB + BA.$$

Se $AB = -BA$ dizemos que A e B anticomutam.

Comutadores e Anti-comutadores das matrizes de Pauli ($j, k = 1, 2, 3$)

$$\begin{aligned} [\sigma^j, \sigma^k] &= 2i \sum_{l=1}^{3} \epsilon_{jkl} \sigma^l \\ \{\sigma^j, \sigma^k\} &= 2\delta_{jk} \mathbb{I} \end{aligned}$$

Comutadores de Operadores Hermitianos

Teorema. Dados dois operadores Hermitianos A e B, então $[A,B]=0$ se e somente se existir uma base ortonormal $\{|j\rangle\}$ na qual A e B são diagonais, ou seja, $A=\sum_j a_j|j\rangle\langle j|$ e $B=\sum_j b_j|j\rangle\langle j|$.

Prova. Assumimos primeiramente que A e B são diagonais na mesma base. Então

$$\begin{aligned}
[A,B] &= \Big(\sum_j a_j|j\rangle\langle j|\Big)\Big(\sum_k b_k|k\rangle\langle k|\Big) - \Big(\sum_k b_k|k\rangle\langle k|\Big)\Big(\sum_j a_j|j\rangle\langle j|\Big)\\
&= \sum_{j,k} a_j b_k\big(|j\rangle\underbrace{\langle j|k\rangle}_{\delta_{jk}}\langle k| - |k\rangle\underbrace{\langle k|j\rangle}_{\delta_{jk}}\langle j|\big)\\
&= \sum_j a_j b_j\big(|j\rangle\langle j| - |j\rangle\langle j|\big)\\
&= 0
\end{aligned}$$

Agora assumimos que A e B comutam, ou seja,

$$[A, B] = 0 \Rightarrow AB = BA.$$

Seja $\{|a_j\rangle\}$ uma base de autovetores **não degenerados** de A com autovalor a_i, teremos

$$AB|a_i\rangle = BA|a_i\rangle = a_i B|a_i\rangle.$$

Portanto $B|a_i\rangle$ também é autovetor de A com autovalor a_i. Isso implica que

$$B|a_i\rangle \propto |a_i\rangle = b_i|a_i\rangle.$$

Com isso vem que B também é diagonal na base $\{|a_i\rangle\}$.

Lei de Leibniz

$$
\begin{aligned}
[A, BC] &= [A, B]C + B[A, C] \\
[AB, C] &= [A, C]B + A[B, C]
\end{aligned}
$$

Verificação.

$$
\begin{aligned}
[A, B]C + B[A, C] &= ABC - BAC + BAC - BCA \\
&= ABC - BCA \\
&= [A, BC]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
[A, C]B + A[B, C] &= ACB - CAB + ABC - ACB \\
&= ABC - CAB \\
&= [AB, C]
\end{aligned}
$$

Identidade de Jacobi

$$[A,[B,C]]+[B,[C,A]]+[C,[A,B]]=0$$

Verificação.

$$\begin{aligned}
&[A,[B,C]]+[B,[C,A]]+[C,[A,B]]\\
&=[A,BC-CB]+[B,CA-AC]+[C,AB-BA]\\
&=ABC-BCA-ACB+CBA+BCA-CAB\\
&\quad -BAC+ACB+CAB-ABC-CBA+BAC\\
&=0
\end{aligned}$$

Lema de Hadamard

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \frac{1}{3!}[A, [A, [A, B]]] + \cdots$$

Prova. Temos

$$\exp(\pm A) = \mathbb{I} \pm A + \frac{A^2}{2!} \pm \frac{A^3}{3!} + \cdots .$$

Assim

$$\begin{aligned}
e^A B e^{-A} &= \left(\mathbb{I} + A + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \cdots\right) B \left(\mathbb{I} - A + \frac{A^2}{2!} - \frac{A^3}{3!} + \cdots\right) \\
&= \left(B + AB + \frac{A^2 B}{2!} + \frac{A^3 B}{3!} + \cdots\right)\left(\mathbb{I} - A + \frac{A^2}{2!} - \frac{A^3}{3!} + \cdots\right) \\
&= B + (-BA + AB) + \left(\frac{BA^2}{2!} - ABA + \frac{A^2 B}{2!}\right) \\
&\quad + \left(-\frac{BA^3}{3!} + \frac{ABA^2}{2!} - \frac{A^2 BA}{2!} + \frac{A^3 B}{3!}\right) + \cdots
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
e^A B e^{-A} &= B + [A,B] + \frac{1}{2!}\,(BAA - 2ABA + AAB) \\
&\quad + \frac{1}{3!}(-BAAA + 3ABAA - 3AABA + AAAB) + \cdots \\
&= B + [A,B] + \frac{1}{2!}((BA - AB)A + A(-BA + AB)) \\
&\quad + \frac{1}{3!}((-BA + AB)AA + 2A(BA - AB)A + AA(-BA + AB)) + \cdots \\
&= B + [A,B] + \frac{1}{2!}(-[A,B]A + A[A,B]) \\
&\quad + \frac{1}{3!}([A,B]AA - 2A[A,B]A + AA[A,B]) + \cdots \\
&= B + [A,B] + \frac{1}{2!} + [A,[A,B]] \\
&\quad + \frac{1}{3!}(([A,B]A - A[A,B])A - A([A,B]A - A[A,B])) + \cdots \\
&= B + [A,B] + \frac{1}{2!} + [A,[A,B]] + \frac{1}{3!}(-[A,[A,B]]A + A[A,[A,B]]) + \cdots \\
&= B + [A,B] + \frac{1}{2!} + [A,[A,B]] + \frac{1}{3!}[A,[A,[A,B]]] + \cdots
\end{aligned}
$$

Outra prova. Define-se $f(s) := \mathrm{e}^{sA} B \mathrm{e}^{-sA}$. Então

$$\begin{aligned} f'(s) &= \mathrm{e}^{sA}[A, B]\mathrm{e}^{-sA} \\ f''(s) &= \mathrm{e}^{sA}[A, [A, B]]\mathrm{e}^{-sA} \\ f'''(s) &= \mathrm{e}^{sA}[A, [A, [A, B]]]\mathrm{e}^{-sA} \\ &\vdots \end{aligned}$$

Expansão de $f(s)$ em série de Taylor em torno de $s = 0$:

$$\begin{aligned} f(s) &= f(0) + sf'(0) + \frac{1}{2!}s^2 f''(0) + \frac{1}{3!}s^3 f'''(0) + \cdots \\ &= B + s[A, B] + \frac{1}{2!}s^2[A, [A, B]] + \frac{1}{3!}s^3[A, [A, [A, B]]] + \cdots \end{aligned}$$

Agora faz $s = 1$. Assim

$$\mathrm{e}^{A} B \mathrm{e}^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \frac{1}{3!}[A, [A, [A, B]]] + \cdots$$

Relação de Baker-Campbell-Housdorff

Dado que $[A,[A,B]] = [B,[A,B]] = 0$ então

$$e^{A+B} = e^{A}e^{B}e^{-[A,B]/2}$$

Prova. Vamos definir $C := e^{xA}e^{xB}$ com x sendo um escalar. Com isso

$$\begin{aligned}
\frac{dC}{dx} &= \left(e^{xA}Ae^{xB} + e^{xA}Be^{xB}\right)e^{-xB}e^{-xA}e^{xA}e^{xB} \\
&= \left(A + e^{xA}Be^{-xA}\right)C \\
&= e^{xA}e^{xB}e^{-xB}e^{-xA}\left(e^{xA}Ae^{xB} + e^{xA}Be^{xB}\right) \\
&= C\left(e^{-xB}Ae^{xB} + B\right)
\end{aligned}$$

Do lema de Hadamard, temos que $e^{xA}Be^{-xA} = B + x[A,B]$ e $e^{-xB}Ae^{xB} = A + x[A,B]$. Por conseguinte

$$\begin{aligned}
\frac{dC}{dx} &= (A + B + x[A,B])\,C \\
&= C\,(A + B + x[A,B])
\end{aligned}$$

Como $[C, (A + B + x[A, B])] = 0$ podemos resolver a equação anterior como uma equação diferencial qualquer. Assim obtemos

$$\begin{aligned} C &= \exp(x(A+B) + x^2[A,B]/2) \\ &= e^{xA}e^{xB}. \end{aligned}$$

Mas

$$\begin{aligned} [x(A+B), x^2[A,B]/2] &= \frac{x^3}{2}([A,[A,B]] + [B,[A,B]]) \\ &:= 0. \end{aligned}$$

Então

$$\exp(x(A+B) + x^2[A,B]/2) = \exp(x(A+B)) \exp(x^2[A,B]/2)$$

e

$$e^{x(A+B)} = e^{xA}e^{xB}e^{-x^2[A,B]/2}.$$

Fazendo $x = 1$ concluímos a demonstração.

Dado um operador linear $A : V \to V$, existe um operador unitário U e operadores positivos J e K tais que

$$A = UJ = KU,$$

com $J = \sqrt{A^\dagger A}$ e $K = \sqrt{AA^\dagger}$.

Prova.

$$J = \sqrt{A^\dagger A} \geq 0 \Rightarrow J = \sum_i J_i |J_i\rangle\langle J_i| \text{ com } (|J_i\rangle, |J_j\rangle) = \delta_{ij}.$$

Assumimos $J_i > 0$ e definimos $|a_i\rangle := J_i^{-1} A|J_i\rangle$. Assim

$$\begin{aligned} (|a_i\rangle, |a_j\rangle) &= J_i^{-1} J_j^{-1} (A|J_i\rangle, A|J_j\rangle) \\ &= J_i^{-1} J_j^{-1} (A^\dagger A|J_i\rangle, |J_j\rangle) \\ &= J_j^{-1} J_i \delta_{ij} \\ &= \delta_{ij} \end{aligned}$$

Definindo $U := \sum_i |a_i\rangle\langle J_i|$ vemos que se $J_i > 0$ então

$$UJ|J_i\rangle = J_i|a_i\rangle = A|J_i\rangle.$$

Se $J_i = 0$ então

$$UJ|J_i\rangle = 0 = |a_i\rangle.$$

Portanto a ação de A e de UJ na base $\{|J_i\rangle\}$ é a mesma e por conseguinte

$$A = UJ.$$

Podemos ver que J é unicamente definido fazendo

$$A^\dagger A = (UJ)^\dagger UJ = J^\dagger U^\dagger UJ = J^2 \Rightarrow J = \sqrt{A^\dagger A}.$$

Temos também que

$$A = UJ = UJU^\dagger U = KU,$$

com $K \geq 0$. Temos ainda que

$$AA^\dagger = UJ(UJ)^\dagger = UJJ^\dagger U^\dagger = UJU^\dagger UJU^\dagger = K^2 \Rightarrow K = \sqrt{AA^\dagger}.$$

Dada uma matriz quadrada A, existem matrizes unitárias U e V e uma matriz positiva e diagonal D tais que

$$A = UDV.$$

Os elementos de D são os valores singulares de A.

Prova. Da decomposição polar vem que

$$A = SJ,$$

sendo S unitária ($SS^\dagger = \mathbb{I} = S^\dagger S$) e J positiva ($J \geq 0$). Do teorema espectral temos

$$J = TDT^\dagger,$$

com T unitária e D diagonal e positiva. Assim, se definimos $U := ST$ e $V := T^\dagger$ obtemos

$$\begin{aligned} A &= STDT^\dagger \\ &:= UDV. \end{aligned}$$