

# Technical Report

## Uma pequena introdução à álgebra para mecânica quântica

Prof. Dr. João Cândido Lima Dovicchi<sup>1</sup>

Florianópolis – SC  
2014

---

<sup>1</sup>Prof. Associado do Departamento de Informática e Estatística da Universidade Fed. de Santa Catarina

# 1 Introdução

A mecânica clássica estuda os sistemas com base em informações sobre cada variável em função do tempo  $x(t)$ . Por exemplo, uma partícula que se move em uma direção e sentido deveria poder ser medida em cada instante de tempo ao longo de sua trajetória para que se pudesse determinar sua massa, momento, velocidade, campo elétrico, campo magnético etc. como se faz com qualquer objeto maior. No entanto, a física tem mostrado outra realidade. As partículas têm estados que são como uma função de onda  $\psi(\vec{x}, t)$  onde  $\vec{x}$  é um vetor em um espaço vetorial complexo. As variáveis físicas que podem ser medidas — os observáveis (*observables*) — são representadas por operadores desta função de onda.

A compreensão de toda esta matemática depende de algumas noções básicas de álgebra linear que vamos introduzir neste *report*. O objetivo deste trabalho é rever de forma direta e resumida alguns conceitos básicos da álgebra linear para podermos compreender as transformações e os operadores usados nas superposições da teoria quântica que formam a base para a computação quântica.

Aqui vamos rever os conceitos de espaços vetoriais; produto interno; autovalores e auto-vetores; operadores lineares; e operadores hermitianos.

Antes, entretanto, convém introduzir uma convenção de notação para vetores conhecida como notação de Dirac [1]. Em 1939, Paul Dirac propôs uma notação específica para vetores a ser usada na mecânica quântica. Esta notação facilitava as operações com vetores, principalmente de vetores do espaço vetorial complexo.

Esta notação é hoje amplamente utilizada na Teoria Quântica. Por exemplo, no lugar de representarmos um vetor  $v$  por  $\vec{v}$ , vamos representá-lo como  $|v\rangle$ . A representação usa os “*brackets*” para representar vetores ( $\langle |$  e  $| \rangle$ ), sendo que os vetores  $\langle v|$  são comumente chamados de *bra-vectors* e os vetores  $|v\rangle$  são chamados de *ket-vectors*. A notação  $\langle u|v\rangle$  representa o produto interno de  $\vec{u} \cdot \vec{v}$ .

Em espaços vetoriais reais, não existe diferença entre “*bras*” e “*kets*” a não ser que podemos relacionar os *bra-vectors* com vetores representados por uma matriz linha ( $M_{1,n}$ ) e os *ket-vectors* com vetores representados por colunas ( $M_{n,1}$ ). Entretanto, no espaço vetorial complexo, os *bra-vectors* representam complexos conjugados.

## 2 Espaços Vetoriais

Um espaço vetorial é um conjunto de elementos vetoriais em um conjunto  $V$  passíveis das operações de soma entre si e de multiplicação por escalares de

forma que o resultado destas operações resultem em elementos que pertençam ao mesmo conjunto  $V$ .

Resumindo,

sejam  $|u\rangle$ ,  $|v\rangle$  e  $|w\rangle$  vetores de espaço  $V$ :

1.  $|u\rangle + |v\rangle \in V$ , isto é, é fechado em relação à soma;
2.  $|u\rangle + |v\rangle = |v\rangle + |u\rangle$ ;
3.  $(|u\rangle + |v\rangle) + |w\rangle = |u\rangle + (|v\rangle + |w\rangle)$ ;
4.  $\exists$  um elemento  $0$  em  $V$  tal que  $0 + |u\rangle = |u\rangle + 0 = |u\rangle$ ;
5.  $\exists$  um vetor  $-|u\rangle$  tal que  $|u\rangle + (-|u\rangle) = 0$ .

sejam, ainda, escalares  $\lambda$  e  $\mu$ , então:

1.  $\lambda \cdot |u\rangle \in V$ , ou seja, é fechado em relação ao produto vetorial.
2.  $\lambda \cdot (|u\rangle + |v\rangle) = \lambda \cdot |u\rangle + \lambda \cdot |v\rangle$ ;
3.  $(\lambda + \mu) \cdot |u\rangle = \lambda \cdot |u\rangle + \mu \cdot |u\rangle$ ;
4.  $\lambda \cdot (\mu \cdot |u\rangle) = (\lambda\mu) \cdot |u\rangle$ ;
5.  $1 \cdot |u\rangle = |u\rangle$ .

A soma entre vetores é chamada de soma vetorial e a multiplicação por escalares pode ser feita por elementos do conjunto real ou do conjunto imaginário. No primeiro caso temos os espaços vetoriais reais denominados de  $\mathbf{R}^n$  e no outro temos os espaços vetoriais complexos, denominados de  $\mathbf{C}^n$ , onde  $n$  é a dimensão do espaço.

Quando pensamos em espaços vetoriais, sempre pensamos na representação geométrica de vetores com suas setas apontando para cá ou para lá. Mas considere o conjunto  $V$  de funções contínuas  $f_n : \mathfrak{R} \mapsto \mathfrak{R}$ , tal que:

$$(f_1 + f_2)(x) = f_1(x) + f_2(x); \text{ e}$$

$$(c \cdot f_1)(x) = c \cdot f_1(x)$$

então, se  $c \in \mathfrak{R}$  e  $f_1, f_2 \in V$  podemos afirmar que  $V$  é um espaço vetorial sobre  $\mathfrak{R}$ .

## 2.1 Bases e dimensões

A base de um espaço vetorial  $V$  é um conjunto de vetores  $(|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_n\rangle)$  linearmente independentes que geram este espaço  $V$  de dimensão  $n$ .

O exemplo mais simples pode ser o do espaço  $\mathbf{R}^2$  em que dois vetores

$$|v_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |v_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

formam uma base que pode gerar todos os vetores do espaço  $\mathbf{R}^2$ . Assim, o vetor  $|a\rangle = (3, 2)^T$  pode ser gerado como:

$$|a\rangle = 3 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + 2 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix}$$

As bases geradoras formadas por vetores unitários são denominadas “bases canônicas” e podem gerar todos os vetores de determinado espaço. Por exemplo, a base canônica de um espaço  $A$  em  $\mathbf{R}^4$  é:

$$|a_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |a_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |a_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |a_4\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

## 2.2 Produto Interno

O conceito de produto é importante para a compreensão da norma de um vetor ou espaços normados. O conceito de norma é importante para a compreensão de estados quânticos de bits (ou qubits).

O produto interno de um espaço vetorial real  $V$  é uma função que associa um número real  $\langle u|v\rangle$  aos vetores  $|u\rangle$  e  $|v\rangle$ , tal que, sejam  $|u\rangle$ ,  $|v\rangle$  e  $|w\rangle$  vetores  $\in V$  e um escalar  $\lambda \in \mathfrak{R}$ :

1.  $\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle$
2.  $\langle w|u + v\rangle = \langle w|u\rangle + \langle w|v\rangle$
3.  $\langle \lambda \cdot u|v\rangle = \lambda \cdot \langle u|v\rangle$
4.  $\langle v|v\rangle \geq 0$
5.  $\langle v|v\rangle = 0 \iff |v\rangle = 0$

Por exemplo, sejam dois vetores em  $\mathbf{R}^3$ :

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |v\rangle = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix}$$

o produto interno  $\langle u|v\rangle$  é dado por:

$$\langle u|v\rangle = (u_1 \quad u_2 \quad u_3) \cdot \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = u_1 \cdot v_1 + u_2 \cdot v_2 + u_3 \cdot v_3$$

Lembre-se que o vetor  $\langle u|$  representa o vetor linha (ou transposto) de  $|u\rangle$ .

### 2.3 Norma de um vetor

A norma de um vetor representa o comprimento ou a magnitude de um vetor e pode ser utilizada para o cálculo de distância entre vetores.

Se  $V$  é um espaço com produto interno, a norma ou comprimento de um vetor  $|u\rangle$  de  $V$ , denotado por  $\|u\|$  é definida como a raiz quadrada do quadrado no produto interno do vetor:

$$\|u\| = \sqrt{\langle u|u\rangle}$$

Por exemplo, seja um vetor  $|v\rangle$  em  $\mathbf{R}^n$  com componentes  $(v_1, v_2, \dots, v_n)$ ,

$$\|v\| = \sqrt{v_1^2 + v_2^2 + \dots + v_n^2}$$

A distância entre dois vetores  $|u\rangle$  e  $|v\rangle$  de  $V$  é expressa pela norma da diferença entre os dois vetores:

$$\|u - v\| = \sqrt{\langle u - v|u - v\rangle}$$

Então, dados os vetores  $|u\rangle$  e  $|v\rangle$  em  $\mathbf{R}^n$ , com componentes  $(u_1, u_2, \dots, u_n)$  e  $(v_1, v_2, \dots, v_n)$ , respectivamente, a distância entre eles é dada por:

$$\|u - v\| = \sqrt{(u_1 - v_1)^2 + (u_2 - v_2)^2 + \dots + (u_n - v_n)^2}$$

O produto escalar de dois vetores no  $\mathbf{R}^2$  pode ser obtido por:

$$a \cdot b = \|a\| \|b\| \cos \theta$$

onde  $\theta$  é o ângulo entre os dois vetores. Desta forma, tendo-se o produto escalar de dois vetores pode-se encontrar o ângulo entre eles:

$$\theta = \arccos \frac{a \cdot b}{\|a\| \|b\|}$$

### 2.4 Auto-valores e Auto-vetores

Se um vetor  $|x\rangle$  multiplicado por uma matriz  $A$  resulta num vetor que é o produto dele por um escalar  $\lambda$ , ou seja, é um múltiplo  $\lambda$  de  $|x\rangle$  dizemos que  $\lambda$  é um autovalor de  $A$  e  $|x\rangle$  é um autovetor associado a  $\lambda$ . Assim:

$$A|x\rangle = \lambda|x\rangle$$

O conceito de autovalor e autovetor é importante porque muitos dos operadores usados na teoria quântica — operadores hermitianos, por exemplo — são operadores lineares que têm autovetores.

### 3 Operadores Lineares

Uma transformação linear é uma transformação de um espaço vetorial em outro. Por exemplo, a transformação de um espaço vetorial  $V$  de  $\mathbf{R}^n$  em  $W$  de  $\mathbf{R}^m$  é uma função  $L$  descrita como  $L : V \rightarrow W$ , por exemplo, sejam  $|u\rangle = (u_1, u_2, \dots, u_n)$  em  $\mathbf{R}^n$  e  $|w\rangle = (w_1, w_2, \dots, w_m)$  em  $\mathbf{R}^m$ :

$$L|u\rangle = |w\rangle$$

$L$  é uma função linear se, e somente se:

$$L|u + v\rangle = L|u\rangle + L|v\rangle \quad \text{e} \quad L|\lambda u\rangle = \lambda L|u\rangle$$

para qualquer  $|u\rangle$  e  $|v\rangle$  em  $\mathbf{R}^n$

Seja uma função linear  $K : V \rightarrow W$  e  $V = W$ , então a função linear mapeia  $\mathbf{R}^n$  em  $\mathbf{R}^n$ , ou seja, dois espaços vetoriais de mesma dimensão. Neste caso, a função linear é chamada de **operador linear** e é representado por  $\hat{K}$ .

Um operador  $\hat{I}$  tal que  $\hat{I}|v\rangle = |v\rangle$  é um operador linear denominado operador identidade. Por exemplo:

### 4 Operadores Hermitianos

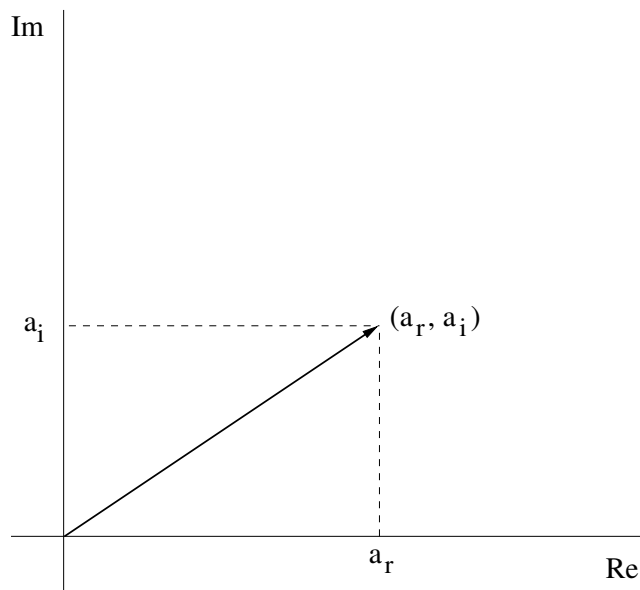
Operadores hermitianos são operadores importantes na teoria da mecânica quântica. Enquanto na mecânica clássica os estados são representações de uma variável em função do tempo e os resultados são medidas possíveis destes estados de forma previsível dependente da precisão da medida, na mecânica quântica os estados de um sistema físico são representados por vetores em um espaço vetorial complexo, denominado espaço de Hilbert ( $\mathbf{L}^n$ ) que contém os vetores de cada estado.

Os resultados ou dados observáveis são representados por autovalores de um operador hermitiano sobre este espaço. Ou seja, o que se observa em um experimento quântico é o autovalor deste operador.

#### 4.1 O espaço vetorial complexo

Um número complexo pode ser definido como um vetor que contém um par ordenado de valores no plano dos números complexos (a parte real e a parte imaginária).

Um número complexo  $z$  é representado, algebricamente, como a soma da parte real com a parte imaginária, por exemplo:



$$z = x + iy$$

onde  $i = \sqrt{-1}$ .

A soma de números complexos é equivalente a soma de vetores, logo podemos somar cada um dos membros (reais e imaginários) de cada um. O mesmo acontece para a subtração.

Por exemplo, sejam  $z_1 = a_r + a_i$  e  $z_2 = b_r + b_i$ , a soma,

$$z_1 + z_2 = c_r + c_i$$

onde,  $c_r = a_r + b_r$  e  $c_i = a_i + b_i$ , ou seja, a parte real da soma é a soma das partes reais e a parte complexa é a soma das partes complexas.

A multiplicação de um número complexo por um escalar  $c \in \mathfrak{R}$  é dada por:

$$cz = ca_r + ca_i$$

A multiplicação de dois pares ordenados imaginários  $(a_r, a_i)$  por  $(b_r, b_i)$  é dada por  $(c_r, c_i)$ , onde:

$$\begin{aligned} c_r &= a_r b_r - a_i b_i \\ c_i &= a_i b_r + a_r b_i \end{aligned}$$

Note que  $a_i b_i$  é real.

## 4.2 Complexo conjugado

O número conjugado de um número complexo  $z = a + ib$  é denominado complexo conjugado  $\bar{z} = a - ib$  e representa o reflexo do número complexo no plano complexo 1.

Os complexos conjugados apresentam as seguintes propriedades:

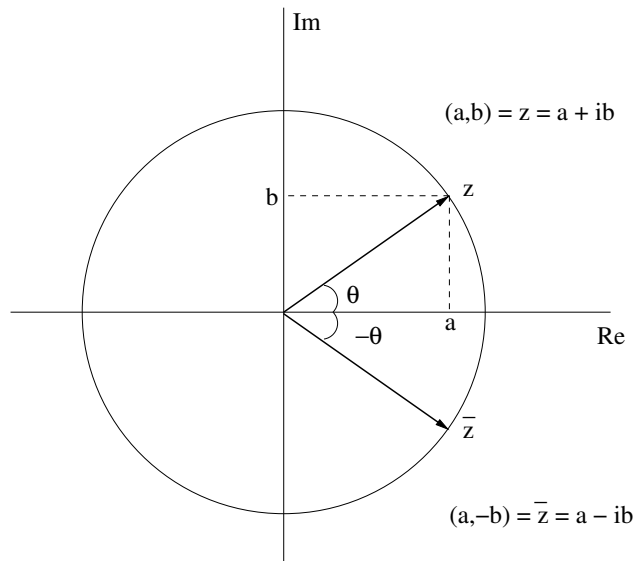


Figura 1: Representação do complexo conjugado no plano complexo ou plano de Argand-Gauss

1.  $|z| = |\bar{z}|$ , ou seja, o módulo do conjugado complexo é o módulo do número complexo;
2.  $z \cdot \bar{z} = |z|^2$ , ou seja, o produto de um número complexo pelo seu conjugado é igual ao quadrado do módulo do número complexo. Seja  $z = x + iy$ :

$$z\bar{z} = x^2 + y^2 ;$$

3.  $z + \bar{z} = 2 \operatorname{Re}(z)$ , ou seja, a soma de um número complexo e seu conjugado é o dobro da parte real do número complexo. Por exemplo, dado  $z = x + iy$ , então:

$$z + \bar{z} = x + iy + x - iy = 2x ; e$$

4.  $z - \bar{z} = 2 \operatorname{Im}(z)$ , ou seja, a diferença de um número complexo e seu conjugado é o dobro da parte imaginária do número complexo. Por exemplo, dado  $z = x + iy$ , então:

$$z - \bar{z} = (x + iy) - (x - iy) = 2iy .$$

O conceito de módulo ou norma de um número complexo está ligado à segunda propriedade, ou seja:

$$z\bar{z} = x^2 + y^2$$

Da primeira propriedade sabemos que  $|z| = |\bar{z}|$ , logo:

$$|z|^2 = x^2 + y^2 \quad e \quad \therefore |z| = \sqrt{x^2 + y^2}$$

que representa a magnitude de um número complexo.



### 4.3 Matrizes Hermitianas

Os componentes de uma matriz podem ser números complexos e a matriz é dita do espaço complexo ou também chamadas de matrizes complexas. Existem, entretanto, algumas matrizes que nos interessam no estudo da mecânica quântica porque são as bases geradoras de operadores que chamamos de Hermitianos.

Uma matriz Hermitiana [2] é uma matriz cuja transposta conjugada é igual à própria matriz, ou seja:

$$\bar{A}^T = A$$

o que equivale a dizer que cada elemento  $a_{jk} = \bar{a}_{kj}$  para todo  $j$  e  $k$ . Podemos representar a matriz Hermitiana por  $A^*$ . Por exemplo, seja:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & i & 1+i \\ -i & -5 & 2-i \\ 1-i & 2+i & 3 \end{pmatrix}$$

$$A^* = \bar{A}^T$$

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} 1 & -i & 1-i \\ i & -5 & 2+i \\ 1+i & 2-i & 3 \end{pmatrix}$$

e, portanto:

$$A^* = \begin{pmatrix} 1 & i & 1+i \\ -i & -5 & 2-i \\ 1-i & 2+i & 3 \end{pmatrix}$$

### 4.4 Operadores hermitianos

Vimos, na definição de operadores lineares, que os operadores são funções que executam transformações em um mesmo espaço vetorial. Podemos definir um tipo especial de operador linear chamado de operador hermitiano, como sendo um operador **auto-adjunto**.

Um operador hermitiano, então, é um operador linear auto-adjunto em um espaço com produto interno que é adjunto de si mesmo. No caso de espaços de dimensão finita, podemos dizer que este operador é representado pela matriz auto-adjunta ou matriz transposta conjugada ou, ainda, uma matriz hermitiana.

Considerando-se um operador hermitiano,  $\hat{H}$ , usando-se a notação de Dirac, podemos escrever que  $\langle A|\hat{H}|A\rangle = \langle A|\hat{H}|A\rangle^*$

Um operador hermitiano deve satisfazer, então, que a matriz transposta conjugada seja igual à matriz original, ou seja:

$$A^\dagger = A$$

e ele é importante porque, em mecânica quântica, as propriedades observáveis (resultados) de um sistema em determinado estado têm que ser representadas por um operador hermitiano.

Sobre operadores hermitianos, podemos sumarizar:

1. Todos os autovalores de um operador hermitiano são reais;
2. Todos os operadores hermitianos têm autovetores;
3. Dois diferentes autovalores de um operador hermitiano têm autovetores que são mutualmente ortogonais;
4.  $\exists D = (\lambda_1 \dots \lambda_n)$  autovetores mutualmente ortogonais de um operador hermitiano; e
5. Autovetores de um operador hermitiano formam uma base ortogonal completa para o referido espaço de Hilbert sobre o qual age o operador.

Para uma revisão dos conceitos básicos sobre espaços de Hilbert, veja o livro online do Prof. João Carlos A. Barata [3], no capítulo 37.

Um operador  $A$  é chamado de anti-hermitiano se  $A^\dagger = -A$  e, consequentemente, se  $A$  é hermitiano então  $iA$  é anti-hermitiano.

## Referências

- [1] DIRAC, P. A. M. A new notation for quantum mechanics. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, v. 35, p. 416–418, 7 1939. ISSN 1469-8064. Disponível em: <[http://journals.cambridge.org/article\\_S0305004100021162](http://journals.cambridge.org/article_S0305004100021162)>.
- [2] ANTON, H.; RORRES, C. *Algebra Linear com Aplicações*. Bookman, 2001. ISBN 9788573078473. Disponível em: <<http://books.google.com.br/books?id=pOaaSKP9IcMC>>.
- [3] BARATA, J. C. A. *Curso de Física Matemática*. 2014. Livro online. Disponível em: <[http://denebola.if.usp.br/~jbarata/Notas\\_de\\_aula/notas\\_de\\_aula.html](http://denebola.if.usp.br/~jbarata/Notas_de_aula/notas_de_aula.html)>.