— Revisão MQ1 —

Notação Dirac

vetores = kets $|\psi\rangle = \sum \psi_n |e_n\rangle \in$ esp. Hilbert $\mathcal{E}$ $\longleftrightarrow$ $\begin{pmatrix}\psi_1\\ \vdots \\ \psi_n\end{pmatrix}$

$\updownarrow$

vetores duais $\equiv$ bras $\langle\psi| = \sum_n \psi_n^* \langle e_n|$ (mapas lineares : $\mathcal{E} \to \mathbb{C}$) $\leftrightarrow (\psi_1^* \ldots \psi_n^*)$

$$\langle e_n|e_m\rangle = \delta_{nm} \quad ; \quad \langle\psi|\varphi\rangle = \sum_j \psi_j^* \varphi_j = \langle\varphi|\psi\rangle^*$$

operadores lineares $A(a|\psi\rangle + b|\varphi\rangle) = aA|\psi\rangle + bA|\varphi\rangle$

expansão em uma base: $A = \sum A_{ij} |e_i\rangle\langle e_j|$
(dim finita)

$$\left[\begin{aligned}(|\alpha\rangle\langle\beta|)|\gamma\rangle &:= |\alpha\rangle(\langle\beta|\gamma\rangle) \\ &= \langle\beta|\gamma\rangle |\alpha\rangle\end{aligned}\right]$$

nessa base $A \longleftrightarrow$ matriz $[A_{ij}]$

$$A|\psi\rangle = \sum_{ij} A_{ij} |e_i\rangle\langle e_j| \left(\sum_n \psi_n |e_n\rangle\right) = \sum_{in} A_{in}\psi_n |e_i\rangle = \sum_i \underbrace{\left(\sum_n A_{in}\psi_n\right)}_{=\psi_i'} |e_i\rangle \equiv |\psi'\rangle$$

$$[A|\psi\rangle]_{d\times 1} = [A_{ij}]_{d\times d} \cdot [\psi]_{d\times 1} = [\psi']_{d\times 1}$$

$$\langle\psi|A = \sum_n \psi_n^* \langle e_n| \sum_{ij} A_{ij} |e_i\rangle\langle e_j| = \sum_{jn} \psi_n^* A_{nj} \langle e_j| = \sum_j \underbrace{\left(\sum_n \psi_n^* A_{nj}\right)}_{=\psi_j'^*} \langle e_j|$$

$$[\langle\psi|A]_{1\times d} = [\langle\psi|]_{1\times d} [A_{ij}]_{1\times d} = [\langle\psi'|]_{1\times d}$$

Notação consistente, i.e. $\langle\psi|(A|\varphi\rangle) = (\langle\psi|A)|\varphi\rangle = \langle\psi|A|\varphi\rangle$

Conjugação Hermitiana: $A^\dagger$ é o op tal que $\langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle^*$

postulados

(1) estados $\longleftrightarrow$ vetores normalizados em um esp. Hilbert $\mathcal{E}$

dim finita : $|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{d} \psi_n |e_n\rangle$, $\sum_n |\psi_n|^2 = 1$;

dim infinita : $|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n |e_n\rangle$ (base discreta)

$= \int d\alpha\, \psi(\alpha) |\alpha\rangle$; $\int |\psi(\alpha)|^2 d\alpha = 1$ $\langle\alpha|\beta\rangle = \delta(\alpha-\beta)$

(base contínua $\rightarrow$ estados ñ físicos)

ex : sistemas de 2 níveis [qubit]

$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$, $|a|^2 + |b|^2 = 1$

na base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$: $|\psi\rangle \Leftrightarrow \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a \underset{|0\rangle}{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}} + b \underset{|1\rangle}{\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}}$

(coordenadas mudam se escolhemos outra base)

ex: na base $\{|\pm\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm |1\rangle)\}$: $|\psi\rangle = a'|+\rangle + b'|-\rangle$, onde $\begin{matrix} a' \\ b' \end{matrix} = \langle\pm|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a \pm b)$

ex: partícula em 1D : $|\psi\rangle = \int \psi(x) |x\rangle dx = \int \tilde{\psi}(p) |p\rangle dp$

onde $\tilde{\psi}(p) = \int \psi(x) \langle p|x\rangle dx$ e $\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{px}{\hbar}}$

omitido em geral

② Quantidades físicas $A \leftrightarrow$ operadores Hermitianos $\hat{A}$

satisfazendo $A = A^{+}$ $\left(\langle \varphi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A | \varphi \rangle^{*} \right)$

obs: em dimensão infinita detalhes adicionais...

teo: todo op. Hermit A é diagonalizável com autovalores reais a_j e uma base de autovetores ortonormais $\{ |\alpha_j\rangle \}$

$$A = \sum_j a_j |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j| \qquad \left[\Rightarrow A|\alpha_k\rangle = a_k |\alpha_k\rangle \right] \qquad \left[\text{nessa base } A \text{ diagonal} \right]$$

ex: $X = \int_{-\infty}^{\infty} x \, |x\rangle\langle x| \, dx$ (espectro contínuo)

ex: $H_{osc.H} = \sum_{n=0}^{\infty} E_n |n\rangle\langle n|$, $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ [espectro discreto]

$\vec{R}$, $\vec{P}$, $\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$ (∞-dim) [observáveis vetoriais]

ex: $S_z = \frac{\hbar}{2} \left[|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-| \right]$ ou $P_{HV} = \left(|H\rangle\langle H| - |V\rangle\langle V| \right)$

$S_x = \frac{\hbar}{2} \left[|+_x\rangle\langle+_x| - |-_x\rangle\langle-_x| \right]$, $|\pm_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|+\rangle \pm |-\rangle \right]$

obs: autovalores podem ser degenerados (repetidos) $\rightarrow$ subespaços degenerados

Reescrevendo: $A = \sum_{j,k} a_j^{(k)} |\alpha_j^{(k)}\rangle\langle\alpha_j^{(k)}|$

j: autoval. distintos

k: cópias distintas do mesmo a_j

Projetor no subespaço com este autovalor: $P_j = \sum_k |\alpha_j^{(k)}\rangle\langle\alpha_j^{(k)}|$ obs: $P_j^2 = P_j$

ex: partícula livre: $H = \frac{P^2}{2m} = \int_0^\infty dE\, E \underbrace{\left[|p=\sqrt{2mE}\rangle\langle p=\sqrt{2mE}| + |p=-\sqrt{2mE}\rangle\langle p=-\sqrt{2mE}| \right]}_{=\text{projetor 2D } P_E}$

teo: se dois ops <u>comutam</u>: $(0 = AB - BA \equiv [A,B])$ então existe uma base na qual <u>ambos</u> são diagonais

ex: $A = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 2 & \\ & & 2 \end{bmatrix}$ $B = \begin{bmatrix} 2 & & \\ & 0 & 1 \\ & 1 & 0 \end{bmatrix}$

diagonais na base $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

teo: num dado esp. de Hilbert, sempre é possível encontrar um C.C.O.C..
[conjunto de ops Hermit., todos mutuamente comut, com uma base comum de autovetores determinados <u>univocamente</u> pelos autovalores de todos os elementos do conjunto]

ex: no átomo de H: $\{H, L^2, L_z\}$ formam um C.C.O.C. (desconsiderando spin...)

③ Probabilidades

Dado um sistema no estado $|\psi\rangle$, a probabilidade de observar o valor a_j para o observável A é

$$\text{prob}(A = a_j) = \| P_j |\psi\rangle \|^2 = \langle\psi| P_j P_j |\psi\rangle = \langle\psi| P_j |\psi\rangle = \sum_k |\langle \alpha_j^{(k)} | \psi\rangle|^2$$

no caso ñ deg: $P_j = |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|$: $p(A = a_j) = |\langle\alpha_j|\psi\rangle|^2$

exemplo (SG) $|\psi\rangle = 1/\sqrt{5}\,|+\rangle + 2/\sqrt{5}\,|-\rangle$

$$P(S_z = +\tfrac{1}{2}\hbar) = |\langle +|\psi\rangle|^2 = 1/5$$

$$P(S_x = +\tfrac{1}{2}\hbar) = |\langle +_x|\psi\rangle|^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{\sqrt{5}} + \frac{2}{\sqrt{5}}\right)\right)^2 = \frac{9}{10}$$

obs: este postulado implica que os vetores $|\psi\rangle$ e $e^{i\theta}|\psi\rangle$, que diferem apenas por uma <u>fase global</u>, descrevem o <u>mesmo</u> estado físico (pois prevêem as mesmas probabilidades p/ qualquer medida).

④ Estado pós-medida

Dado um sistema no estado $|\psi\rangle$, se medimos o observável A e encontramos a_j, o sistema passa para o novo estado (normalizado)

$$|\tilde{\psi}\rangle = \frac{P_j|\psi\rangle}{\| P_j|\psi\rangle\|}$$

5 Evol. temporal

Um sistema quântico evolui no tempo de acordo c. a eq. de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H|\psi(t)\rangle$$

solução formal (requer saber autovalores/vetores de H)

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,k} e^{-iE_n t/\hbar} |E_n^{(k)}\rangle$$

ex: se $H = \hbar\begin{bmatrix}\alpha & \beta \\ \beta & \alpha\end{bmatrix} = \hbar\left(\alpha \overbrace{\begin{bmatrix}1 & 0 \\ 0 & 1\end{bmatrix}}^{I} + \beta \overbrace{\begin{bmatrix}0 & 1 \\ 1 & 0\end{bmatrix}}^{\sigma_x}\right)$

autovetores de H = autovetores de σ_x : $\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|0\rangle \pm |1\rangle\right] \equiv |\pm\rangle \longleftrightarrow$ autovalores ± 1

$\Rightarrow$ autovalores de $H = (\alpha \pm \beta)\hbar \equiv E_\pm$

Se $|\psi(0)\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle = a'|+\rangle + b'|-\rangle$ (v. acima)

$$\rightarrow |\psi(t)\rangle = a' e^{-iE_+ t/\hbar}|+\rangle + b' e^{-iE_- t/\hbar}|-\rangle = \underbrace{e^{-i\alpha t}}_{\text{fase global (pode ser ignorada)}}\left[a' e^{-i\beta t}|+\rangle + b' e^{+i\beta t}|-\rangle\right]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(a+b)e^{-i\beta t}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + |1\rangle\right) + \frac{1}{\sqrt{2}}(a-b)e^{+i\beta t}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle - |1\rangle\right)$$

$$= \left(a\cos\beta t - i\, b\,\mathrm{sen}\,\beta t\right)|0\rangle + \left(-ia\,\mathrm{sen}\,\beta t + b\cos\beta t\right)|1\rangle$$

6 Composição de graus de liberdade

Chamamos de <u>grau de liberdade</u> de um sistema quântico ao conjunto de propriedades associadas com um determinado espaço de Hilbert

ex: o grau de liberdade de <u>movimento</u> de uma partícula em 1D está associado a um espaço $\mathcal{E}$ de dimensão infinita parametrizável com 1 parâmetro contínuo. [note que posição, momento linear, energia etc. são todos observáveis relacionados ao <u>mesmo</u> grau de liberdade].

ex: o grau de liberdade de <u>spin</u> de um elétron está associado a um espaço $\mathcal{E}$ de dimensão 2 [note que os observáveis S_x, S_y, S_z, S^2 etc. são todos relacionados ao <u>mesmo</u> g.d.l., que é <u>independente</u> porém do movimento do elétron].

<u>Postulado</u>: Se um g.d.l. de um sistema quântico é descrito pelo esp. de Hilbert $\mathcal{E}_A$ e um segundo g.d.l. <u>independente</u> é descrito por outro espaço $\mathcal{E}_B$, então o sistema total composto por <u>ambos</u> os g.d.l. é descrito pelo <u>produto tensorial</u> $\mathcal{E}_A \otimes \mathcal{E}_B$ desses espaços

Vamos agora definir o que significa essa operação matemática, e ver algumas implicações do postulado:

Tensor products and entanglement [Cohen II-F]

Mathematical definition

Given $\mathcal{E}_A$, $\mathcal{E}_B$ two Hilbert spaces of dimensions d_1, d_2 (possibly ∞)
with bases $\{|e_j\rangle_A\}$; $\{|f_k\rangle_B\}$

tensor product: for each pair of states $|\varphi\rangle_A \in \mathcal{E}_A$, $|\psi\rangle_B \in \mathcal{E}_B$ define

a new "tensor product" state denoted $|\varphi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B \equiv |\varphi\rangle_A |\psi\rangle_B \equiv |\varphi\psi\rangle_{AB}$

omitted where clear

with the following properties

- bi-linearity

$$\begin{cases} (a|\varphi_1\rangle + b|\varphi_2\rangle) \otimes |\psi\rangle = a(|\varphi_1\rangle \otimes |\psi\rangle) + b(|\varphi_2\rangle \otimes |\psi\rangle) \quad , \forall\ a, b, |\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, |\psi\rangle \\ |\varphi\rangle \otimes (a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle) = a|\varphi\rangle|\psi_1\rangle + b|\varphi\rangle|\psi_2\rangle \end{cases}$$

- scalar product: $(\langle\alpha| \otimes \langle\beta|)(|\gamma\rangle \otimes |\delta\rangle) = \langle\alpha|\gamma\rangle \cdot \langle\beta|\delta\rangle$

Def: $\mathcal{E}_A \otimes \mathcal{E}_B \equiv d_1 \cdot d_2$-dim space generated by the tensor product of the respective bases

$$\mathcal{E}_A \otimes \mathcal{E}_B \equiv \left\{ \sum_{j,k} a_{jk} |e_j f_k\rangle_{AB} \right\} \equiv \text{linear span of } |e_j\rangle_A \otimes |f_k\rangle_B$$

Coordinates:

$|\alpha\rangle_{AB} = \sum_{jk} a_{jk} |e_j\rangle \otimes |f_k\rangle$ has coordinates $a_{jk} = \langle e_j f_k | \alpha \rangle$

ex: if $|\psi\rangle_A$ has coordinates $c_j = {}_A\langle e_j | \psi \rangle_A$ in basis $\{|e_j\rangle_A\}$
$|\varphi\rangle_B$ " " $d_k = {}_B\langle f_k | \varphi \rangle_B$ " " $\{|f_k\rangle_B\}$

For <u>product vectors</u>: $|\psi\rangle_A \otimes |\varphi\rangle_B \equiv |\psi\varphi\rangle$:

$$a_{jk} = \langle e_j f_k | \psi\varphi \rangle = \langle e_j | \psi \rangle \langle f_k | \varphi \rangle = c_j d_k \quad \text{[factorizes]}$$

<u>However</u>

<u>Crucial property</u>: not all states of a tensor product are themselves tensor products !!

ex: $|S\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|01\rangle - |10\rangle \right]_{AB}$

<u>exercise</u>: prove $|S\rangle_{AB}$ <u>cannot</u> be written as $|\psi\rangle_A \otimes |\varphi\rangle_B$, $\forall\, |\psi\rangle_A, |\varphi\rangle_B$

(actually, the vast majority of states are <u>entangled</u> in this way)

Full implications still being explored (and beyond this course)

ex: much larger space for quantum computers to evolve in

<u>Postulate</u>: if a degree of freedom of a quantum system is described by states in HS $\mathcal{E}_A$, and a second <u>independent</u> d.o.f. is described by states in $\mathcal{E}_B$, then the full system composed of both dof's is described by states in $\mathcal{E}_A \otimes \mathcal{E}_B$

example: movement in directions X and Y of 1 particle

example: position state of 2 particles

example: 2 2-level atoms

develop on board

example: n qubits $\longrightarrow$ 2^n basis states

example (more later) spin + position of single particle

Tensor product of operators

$$(M_A \otimes N_B)\,|e_j\rangle_A |f_k\rangle_B \equiv M|e_j\rangle_A \otimes N|f_k\rangle_B \qquad (+\text{ linear extension})$$

- $M_A \Longleftrightarrow M_A \otimes \mathbb{1}_B$; $N_B \Longleftrightarrow \mathbb{1}_A \otimes N_B$; $[M_A, N_B] = 0$
- note: $(M\otimes N)(M'\otimes N') = MM' \otimes NN'$

- spectrum of $M\otimes N$ contains all products of eigenvalues $m_j n_k$
- spectrum of $M_A + N_B$ contains all sums $m_a + n_b$

matrices of $M\otimes N$

Standard ordering of the product basis: $\{|e_1 f_1\rangle, \dots |e_1 f_{d_B}\rangle, |e_2 f_1\rangle \dots |e_2 f_{d_B}\rangle \dots |e_{d_A} f_{d_B}\rangle\}$

in this case the matrix elements of $M\otimes N$ in the $\{|e_j f_k\rangle\}$ basis are

$$(M\otimes N)_{\ell m, jk} = \langle e_\ell f_m | M\otimes N | e_j f_k\rangle = M_{\ell j} N_{mk}$$

ex: let $M = \begin{pmatrix} m_1 & m_2 \\ m_3 & m_4 \end{pmatrix}$ wrt basis $\{|e_j\rangle_A\}$; $N = \begin{pmatrix} n_1 & n_2 \\ n_3 & n_4 \end{pmatrix}$ wrt basis $\{|f_k\rangle_B\}$

then $M\otimes N$ (4x4 matrix):

$$\begin{bmatrix} m_1 [N]_{2\times 2} & m_2 [N]_{2\times 2} \\ m_3 [N]_{2\times 2} & m_4 [N]_{2\times 2} \end{bmatrix} =$$

	00	01	10	11
00	$m_1 n_1$	$m_1 n_2$	$m_2 n_1$	$m_2 n_2$
01	$m_1 n_3$	$m_1 n_4$	$m_2 n_3$	$m_2 n_4$
10	$m_3 n_1$	$m_3 n_2$	$m_4 n_1$	$m_4 n_2$
11	$m_3 n_3$	$m_3 n_4$	$m_4 n_3$	$m_4 n_4$

ex: $A_{d\times d} \otimes \mathbb{1}_{d\times d}$:

$$\begin{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_{11} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} a_{12} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_{12} \end{bmatrix} & \cdots & \begin{bmatrix} a_{1d} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_{1d} \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} a_{21} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_{21} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} a_{22} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_{22} \end{bmatrix} & \cdots & \begin{bmatrix} a_{2d} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_{2d} \end{bmatrix} \\ \vdots & & & \vdots \\ \begin{bmatrix} a_{d1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_{d1} \end{bmatrix} & & \cdots & \begin{bmatrix} a_{dd} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_{dd} \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$

$\mathbb{1} \otimes A$:

$$\left.\begin{bmatrix} [A] & & & 0 \\ & [A] & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & [A] \end{bmatrix}\right\} d \text{ copies}$$

note: just as most states in $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$ cannot be written as products, the same holds for operators: most operators on $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$ cannot be written as products $M \otimes N$