INTRODUÇÃO À COMPUTAÇÃO QUÂNTICA

Isabela de Castro Shimano (PIBIC/CNPq/FA/UEM), Eduardo Brandani da Silva (Orientador). E-mail: ebsilva@uem.br

Universidade Estadual de Maringá, Centro de Ciências Exatas, Maringá, PR.

Matemática/Matemática Aplicada

Palavras-chave: Álgebra Linear, vetores, mecânica quântica**.**

RESUMO

Este projeto de iniciação científica tem como propósito estudar e solidificar os fundamentos em Álgebra Linear, com ênfase no tópico que descreve o produto tensorial de espaços de Hilbert, tornando possível, dessa forma, a introdução dos postulados da Mecânica Quântica, a partir dos quais se descrevem sistemas quânticos e seus estados. Portanto, a metodologia do estudo consiste em abordar, de forma teórica e conceitual, toda a fundamentação que antecede a definição dos espaços de Hilbert e prossegue, com ênfase, no conceito de produto tensorial na descrição de sistemas quânticos *compostos*.

INTRODUÇÃO

A partir dos estudos apresentados neste projeto, compreende-se que a Mecânica Quântica abrange, principalmente, o estudo de sistemas quânticos e sua formalização matemática conforme vetores de estados físicos. Sabendo disso, tem-se que tais sistemas são determinados por fragmentos da realidade destinados, isoladamente, ao estudo teórico e experimental, como, por exemplo, um elétron, um próton ou um conjunto específico de elementos. Assim, a Álgebra Linear se apresenta como ferramenta essencial para fundamentar as propriedades dos espaços de Hilbert, que descrevem de forma relevante os espaços onde se localizam tais estados físicos do sistema quântico e as condições as quais constituem toda a sua estrutura matemática.

Logo, com base no capítulo 2 de *Quantum Computation and Quantum Information*, de Michael A. Nielsen e Isaac L. Chuang, é feita uma pesquisa que aborda desde vetores e espaços vetoriais até produto tensorial e outras operações sobre os espaços de Hilbert. Dessa forma, é possível compreender a descrição não apenas de sistemas físicos simples, mas de sistemas quânticos *compostos*, que são os objetos de estudo de maior interesse do projeto. O produto tensorial, particularmente, envolve o conhecimento de operadores lineares e suas operações, produto interno, bases ortonormais, produto de *Kronecker*, operadores unitários, normais e, também, Hermitianos. Dado isso, é possível compreender, de forma construtiva, o Postulado 4 da Mecânica Quântica, o qual evidencia a descrição citada dos sistemas físicos compostos, que se apresenta conforme um espaço de estados que pode ser construído a partir de subspaços de estados do sistema.

MATERIAIS E MÉTODOS

A metodologia consistiu na leitura do capítulo 2 de *Quantum Computation and Quantum Information*, de Michael A. Nielsen e Isaac L. Chuang, e de artigos sobre o assunto, além da apresentação de seminários semanais com o orientador. A aluna dedicou-se ao desenvolvimento de demonstrações matemáticas, utilizando o formalismo da Álgebra Linear e dos postulados da Mecânica Quântica, com carga horária de 20 horas semanais de dedicação ao projeto.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A seguir, apresentam-se os resultados e discussões gerados pelos estudos do material selecionado, pela resolução de seus exercícios e pela formalização com base nos seminários semanais propostos. Mais informações e aprofundamentos da teoria e da fundamentação construtiva dos conceitos podem ser encontrados nas referências bibliográficas ao final do texto.

Em suma, o conteúdo abordado previamente à definição de produto tensorial comporta a formalização do que é um espaço de Hilbert: considera-se a estrutura definida previamente de um espaço vetorial V, a qual abrange duas operações básicas (soma e multiplicação por escalar) essenciais para a construção do espaço e das relações entre seus elementos, os *vetores*, além da aplicação de funções e de operadores lineares. A partir disso, formaliza-se o produto interno entre vetores quaisquer $|v\rangle, |w\rangle \in V$, denotado por $\langle v|w\rangle$, conforme o qual é definido que: um espaço de Hilbert é dado por um espaço vetorial munido de produto interno bem definido. Assim, define-se o espaço de Hilbert $\mathbb{C}^n$ das n-úplas complexas, o qual será estudado neste projeto.

Portanto, dada uma base ortonormal $\mathcal{B} = \{|i\rangle\}$, ou seja, um conjunto de vetores de índice i linearmente independentes e normalizados os quais geram o espaço em $\mathbb{C}^n$, e, dados dois vetores $|v\rangle = \sum_{i=1}^{n} v_i\,|i\rangle$ e $|w\rangle = \sum_{j=1}^{n} w_j\,|j\rangle$ independentes, ortogonais, normalizados e gerados por essa base, o produto interno entre $|v\rangle$ e $|w\rangle$ é determinado pela operação

$$\begin{aligned}\langle v|w\rangle &= \left(\sum_{i=1}^{n} v_i\,|i\rangle, \sum_{j=1}^{n} w_j\,|j\rangle\right)\\ &= \sum_{i,j=1}^{n} {v_i}^{*}\, w_j \delta_{ij}\\ &= [v_1^{*} \ldots v_n^{*}] \begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix},\end{aligned}$$

em que, a norma de um vetor $|v\rangle$ é definida por $\| v \| = \sqrt{\langle v|v\rangle}$ e a ortonormalidade corresponde à condição em que os vetores são mutuamente ortogonais e possuem norma igual a 1, isto é, $\langle v_i|v_j\rangle = \delta_{ij}$.

Assim sendo, os operadores lineares em $\mathbb{C}^n$ são definidos por uma função T entre dois espaços vetoriais $V, W \subseteq \mathbb{C}^n$ com escalares em $\mathbb{C}$ onde, dado que

$$\begin{array}{rcl} T: V & \to & W \\ x & \mapsto & T(x) \end{array}$$

deve-se ter, essencialmente,

$$T(\alpha x + \beta y) = \alpha T(x) + \beta T(y),$$

para todo $x, y \in V$ e para todo $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$.

Dessa forma, introduzem-se as definições de operadores unitários, Hermitianos e normais, conforme se usa o conceito de uma matriz transposta conjugada, denotada como adjunta ($A^\dagger$). Segundo tal definição, uma matriz A é Hermitiana se $A^\dagger = A$ e é normal se $AA^\dagger = A^\dagger A$. Além do mais, uma transformação linear U é dita unitária se satisfaz $UU^\dagger = I = U^\dagger U$.

Assim sendo, o estudo introduz o conceito de produto tensorial: dados os espaços de Hilbert V e W finitos e com respectivas bases $\{|v_1\rangle, \ldots, |v_n\rangle\}$ e $\{|w_1\rangle, \ldots, |w_m\rangle\}$, o produto tensorial entre V e W é um espaço de Hilbert $V \otimes W$ de dimensão mn tal que $\{|v_i\rangle \otimes |w_j\rangle; 1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq m\}$ é uma base desse espaço. Portanto, tem-se que um vetor genérico de $V \otimes W$ é uma combinação linear de tensores simples da forma $|v_i\rangle \otimes |w_j\rangle$ com $1 \leq i \leq n$, $1 \leq j \leq m$, $|v_i\rangle \in V$ e $|w_j\rangle \in W$. Logo, se $|\psi\rangle \in V \otimes W$, tal vetor é dado por

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} a_{ij} |v_i\rangle \otimes |w_j\rangle,$$

conforme é determinado que, para $|v\rangle, |v_1\rangle, |v_2\rangle \in V$, $|w\rangle, |w_1\rangle, |w_2\rangle \in W$ e escalares $a, b \in \mathbb{C}$,

$$|v\rangle \otimes (a|w_1\rangle + b|w_2\rangle) = a(|v\rangle \otimes |w_1\rangle) + b(|v\rangle \otimes |w_2\rangle),$$

$$(a|v_1\rangle + b|v_2\rangle) \otimes |w\rangle = a(|v_1\rangle \otimes |w\rangle) + b(|v_2\rangle \otimes |w\rangle).$$

Dados A um operador sobre V e B um operador sobre W, definimos, também, $A \otimes B$ um operador sobre $V \otimes W$ tal que

$$(A \otimes B)(|v\rangle \otimes |w\rangle) = (A|v\rangle) \otimes (B|w\rangle).$$

Dessa forma, se temos um vetor qualquer

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} a_{ij} |v_i\rangle \otimes |w_j\rangle,$$

então, a linearidade do operador $A \otimes B$ sobre $|\psi\rangle$ satisfaz

$$(A \otimes B)(|\psi\rangle) = (A \otimes B)(\sum_{i,j=1}^{n} a_{ij} |v_i\rangle \otimes |w_j\rangle) = \sum_{i,j=1}^{n} a_{ij} A|v_i\rangle \otimes B|w_j\rangle.$$

Além do mais, dado o caso em que $A: V \to V'$ e $B: W \to W'$, ou seja, A e B operam sobre diferentes espaços, um operador linear $C: V \otimes W \to V' \otimes W'$ pode ser representado por uma combinação linear de produtos tensoriais de operadores que operam de $V \to V'$ e $W \to W'$:

$$C = \sum_i c_i A_i \otimes B_i = \sum_i c_i A_i |v\rangle \otimes B_i |w\rangle.$$

Portanto, é formalizada, matematicamente, a descrição de sistemas quânticos compostos conforme o postulado 4 de *Quantum Computation and Quantum Information*: se sistemas quânticos A e B possuem, respectivamente, espaços de estados $(\mathcal{H}_A)$ e $(\mathcal{H}_B)$, então o espaço de estados do sistema composto é dado por $\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, em que um estado desse sistema composto pode ser representado pelo produto tensorial $|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle$.

CONCLUSÕES

Em conclusão, tem-se que os tópicos abordados na pesquisa são imprescindíveis para a introdução dos estudos em Mecânica Quântica, visto que se tratam de uma contextualização matemática essencial para formalizar e solidificar a estrutura em que se estabelecem os postulados, os quais descrevem os sistemas físicos quânticos e permitem a *observação* de estados.

AGRADECIMENTOS

Agradeço veementemente ao meu orientador Eduardo Brandani, à CNPq e à Universidade Estadual de Maringá pela oportunidade que me foi dada de crescer dentro do campus e aprender a relevância dos estudos e do afeto no ensino. Obrigado por me darem a chance de efetivar a minha primeira iniciação científica.

REFERÊNCIAS

INSTITUTE FOR QUANTUM COMPUTING. *Mathematics of Quantum Mechanics*. Waterloo: University of Waterloo, 2023.

BOLDRINI, José Luiz; COSTA, Sueli I. R.; FIGUEIREDO, Vera Lúcia; GOMES, Maria Cristina. *Álgebra Linear*. São Paulo: Harper & Row do Brasil, 1980.

INSTITUTE FOR QUANTUM COMPUTING. *Mathematics of Quantum Mechanics*. Waterloo: University of Waterloo, 2023.

LIMA, Elon Lages. *Álgebra Linear*. 10. ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2020.

NIELSEN, Michael A.; CHUANG, Isaac L. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.