04_functions

August 29, 2019

Notas de aula: Mecânica Quântica, Autor: Jonas Maziero, Departamento de Física, UFSM

```
In [1]: %run init.ipynb
```

1 Funções matriciais de matrizes

Já vimos algumas funções escalares de operadores/matrizes, como por exemplo o determinante, o traço, o produto interno, a norma, etc. Aqui veremos como devemos proceder para calcular funções de operadores que nos retornam operadores, como por exemplo $\log(\cdot)$, $\exp(\cdot)$, $\sqrt{\cdot}$, etc.

OBS. A primeira observação que deve-se fazer nesse tópico é que nossa intuição de como aplicar funções matriciais em matrizes está, em geral, errada, i.e., se $A = (A_{j,k})$, em geral

$$f(A) \neq (f(A_{j,k})). \tag{1}$$

1.0.1 Definição de $f(A)$

Seja $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ um operador linear e seja

$$f(x) = \sum_{j=0}^{\infty}\left(\frac{1}{j!}\frac{d^j f(x)}{dx^j}\right)x^j \tag{2}$$

a expansão em série de Taylor para a função escalar $f(x)$. A função f tendo operadores lineares como argumento é calculada substituíndo-se, na série de Taylor, o escalar x pelo operador linear correspondente. #### Exemplo Como $e^x = \sum_{j=0}^{\infty} x^j/j! = 1 + x + x^2/2 + x^3/3! + \cdots$, teremos

$$e^A = \mathbb{I}_{\mathcal{H}} + A + \frac{A^2}{2} + \frac{A^3}{3!} + \cdots, \tag{3}$$

onde A^j é a composição de A por j vezes.

Exemplo Para $\{\sigma_j\}_{j=1}^{3}$ sendo as matrizes de Pauli e $\vec{n} \in \mathbb{R}^3$, definimos

$$\vec{n}\cdot\vec{\sigma} := \sum_{j=1}^{3} n_j\sigma_j. \tag{4}$$

Para o resultado que provaremos na sequência, utilizaremos a seguinte indentidade:

$$
\begin{aligned}
(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^2 &= \sum_{j=1}^{3} n_j\sigma_j \sum_{k=1}^{3} n_k\sigma_k = \sum_{j,k=1}^{3} n_j n_k \sigma_j\sigma_k && (5)\\
&= \sum_{j,k=1}^{3} n_j n_k(\delta_{j,k}\sigma_0 + sgn(j,k,l)i\sigma_l) && (6)\\
&= \sum_{j=1}^{3} n_j^2\sigma_0 + \sum_{j\neq k} n_j n_k sgn(j,k,l)i\sigma_l && (7)\\
&= ||\vec{n}||^2\sigma_0 + n_1n_2sgn(1,2,3)i\sigma_3 + n_2n_1sgn(2,1,3)i\sigma_3 && (8)\\
&+ n_1n_3sgn(1,3,2)i\sigma_2 + n_3n_1sgn(3,1,2)i\sigma_2 + n_2n_3sgn(2,3,1)i\sigma_1 + n_3n_2sgn(3,2,1)i\sigma_1 && (9)\\
&= ||\vec{n}||^2\sigma_0 + (n_1n_2 - n_2n_1)i\sigma_3 + (-n_1n_3 + n_3n_1)i\sigma_2 + (n_2n_3 - n_3n_2)i\sigma_1 && (10)\\
&= ||\vec{n}||^2\sigma_0. && (11)
\end{aligned}
$$

Agora, para $||\vec{n}|| = 1$, $\theta \in \mathbb{R}$ e $\sigma_0 = \mathbb{I}_{\mathbb{C}_2}$, usamos a série de Taylor para a exponencial e $(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^2 = ||\vec{n}||^2\sigma_0$ para obter:

$$
\begin{aligned}
e^{i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma}} &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^j}{j!} && (12)\\
&= \sigma_0 + i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma} + \frac{(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^2}{2!} + \frac{(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^3}{3!} + \frac{(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^4}{4!} + \frac{(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^5}{5!} + \cdots && (13)\\
&= \sigma_0 + i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma} - \frac{\theta^2\sigma_0}{2!} - \frac{i\theta^3\vec{n}\cdot\vec{\sigma}}{3!} + \frac{\theta^4\sigma_0}{4!} + \frac{i\theta^5\vec{n}\cdot\vec{\sigma}}{5!} + \cdots && (14)\\
&= \sigma_0(1 - \frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} - \cdots) + i\vec{n}\cdot\vec{\sigma}(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} - \cdots) && (15)\\
&= \sigma_0\cos\theta + i\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\sin\theta. && (16)
\end{aligned}
$$

1.0.2 Fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff

Para $c \in \mathbb{C}$ e $A, B \in L(\mathcal{H})$ segue que

$$
e^{cB}Ae^{-cB} = A + c[B,A] + \frac{c^2}{2!}[B,[B,A]] + \frac{c^3}{3!}[B,[B,[B,A]]] + \cdots . \tag{17}
$$

Vamos verificar essa igualdade expandindo a exponencial em série de Taylor:

$$
\begin{aligned}
e^{cB}Ae^{-cB} &= \left(\sum_{j=0}^{\infty}\frac{(cB)^j}{j!}\right) A \left(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-cB)^k}{k!}\right) && (18)\\
&= \left(\mathbb{I} + cB + \frac{c^2B^2}{2} + \frac{c^3B^3}{3!} + \cdots\right) A \left(\mathbb{I} - cB + \frac{c^2B^2}{2} - \frac{c^3B^3}{3!} + \cdots\right) && (19)\\
&= A + cBA - cAB + \frac{c^2B^2}{2}A + A\frac{c^2B^2}{2} - \frac{2}{2}cBAcB - \frac{c^2B^2}{2}AcB + cBA\frac{c^2B^2}{2} + \frac{c^3B^3}{3!}A - A\frac{c^3B^3}{3!} + \cdots && (20)\\
&= A + c[B,A] + \frac{c^2}{2}(BBA + ABB - 2BAB) + \frac{c^3}{3!}(BBBA - ABBB + 3BABB - 3BBAB) + \cdots && (21)\\
&= A + c[B,A] + \frac{c^2}{2}(B(BA - AB) + (AB - BA)B) + \frac{c^3}{3!}(BB(BA - AB) - (AB - BA)BB + 2B(ABB - B\ldots && (22)\\
&= A + c[B,A] + \frac{c^2}{2}(B[B,A] - [B,A]B) + \frac{c^3}{3!}(BB[B,A] + [B,A]BB - 2B[B,A]B)) + \cdots && (23)\\
&= A + c[B,A] + \frac{c^2}{2}[B,[B,A]] + \frac{c^3}{3!}(B(B[B,A] - [B,A]B) + ([B,A]B - B[B,A])B) + \cdots && (24)\\
&= A + c[B,A] + \frac{c^2}{2}[B,[B,A]] + \frac{c^3}{3!}(B[B,[B,A]] - [B,[B,A]B) + \cdots && (25)\\
&= A + c[B,A] + \frac{c^2}{2!}[B,[B,A]] + \frac{c^3}{3!}[B,[B,[B,A]]] + \cdots\,. && (26)
\end{aligned}
$$

1.0.3 Exemplo

Para

$$A = \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \text{ e } B = \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \qquad (27)$$

temos

$$[\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y \text{ e } [\sigma_z, \sigma_y] = -2i\sigma_x. \qquad (28)$$

Assim

$$
\begin{aligned}
e^{c\sigma_z}\sigma_x e^{-c\sigma_z} &= \sigma_x + c[\sigma_z,\sigma_x] + \frac{c^2}{2}[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_x]] + \frac{c^3}{3!}[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_x]]] && (29)\\
&+ \frac{c^4}{4!}[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_x]]]] + \frac{c^5}{5!}[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_x]]]]] + \cdots && (30)\\
&= \sigma_x + c2i\sigma_y + \frac{c^2}{2}2i[\sigma_z,\sigma_y] + \frac{c^3}{3!}2i[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_y]] + \frac{c^4}{4!}2i[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_y]]] + \frac{c^5}{5!}2i[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_y]]]] + \cdots && (31)\\
&= \sigma_x + c2i\sigma_y - \frac{c^2}{2}4i^2\sigma_x - \frac{c^3}{3!}4i^2[\sigma_z,\sigma_x] - \frac{c^4}{4!}4i^2[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_x]] - \frac{c^5}{5!}4i^2[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_x]]] + \cdots && (32)\\
&= \sigma_x + c2i\sigma_y - \frac{(2ic)^2}{2}\sigma_x - \frac{c^3}{3!}8i^3\sigma_y - \frac{c^4}{4!}8i^3[\sigma_z,\sigma_y] - \frac{c^5}{5!}8i^3[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_y]] + \cdots && (33)\\
&= \sigma_x + c2i\sigma_y - \frac{(2ic)^2}{2}\sigma_x - \frac{c^3}{3!}8i^3\sigma_y + \frac{c^4}{4!}16i^4\sigma_x + \frac{c^5}{5!}16i^4[\sigma_z,\sigma_x] + \cdots && (34)\\
&= \sigma_x + c2i\sigma_y - \frac{(2ic)^2}{2}\sigma_x - \frac{(2ic)^3}{3!}\sigma_y + \frac{(2ic)^4}{4!}\sigma_x + \frac{(2ic)^5}{5!}\sigma_y + \cdots && (35)\\
&= \sigma_x\left(1 - \frac{(2ic)^2}{2!} + \frac{(2ic)^4}{4!} + \cdots\right) + \sigma_y\left(2ci - \frac{(2ic)^3}{3!} + \frac{(2ic)^5}{5!} + \cdots\right) && (36)\\
&= \sigma_x\cos(2ic) + \sigma_y\sin(2ic). && (37)
\end{aligned}
$$

Exercício: Utilize a fórmula de BCH para calcular $e^{c\sigma_x}\sigma_y e^{-c\sigma_x}$.

1.0.4 Definição de $f(A)$ para operadores normais

Se $A = \sum_a aP_a$ é a decomposição espectral do operador linear, então suas funções podem ser calculadas usando

$$f(A) := \sum_a f(a)P_a, \tag{38}$$

ou seja, atuamos a função nos autovalores.

Vamos verificar que **essa definição é equivalente à anterior**. Como mostrado por Taylor, se decompomos uma função escalar qualquer em termos de potências de x:

$$f(x) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j x^j, \tag{39}$$

os coeficientes são dados como na série de Maclaurin, i.e., $c_j = \frac{1}{j!}\frac{d^j f(x)}{dx^j}$. Assim, como

$$
\begin{aligned}
A^j &= AAA\cdots = \sum_a aP_a \sum_{a'} a'P_{a'} \sum_{a''} a''P_{a''}\cdots && (40)\\
&= \sum_{a,a',a'',\cdots} aa'a''\cdots P_aP_{a'}P_{a''}\cdots && (41)\\
&= \sum_{a,a',a'',\cdots} aa'a''\cdots \delta_{aa'}\delta_{a'a''}\cdots P_a && (42)\\
&= \sum_a a^j P_a, && (43)
\end{aligned}
$$

teremos que

$$f(A) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j A^j \tag{44}$$
$$= \sum_{j=0}^{\infty} c_j \sum_a a^j P_a \tag{45}$$
$$= \sum_a (\sum_{j=0}^{\infty} c_j a^j) P_a \tag{46}$$
$$= \sum_a f(a) P_a. \tag{47}$$

Exemplo

$$e^A = \mathbb{I}_{\mathcal{H}} + A + \frac{A^2}{2} + \frac{A^3}{3!} + \cdots \tag{48}$$
$$= \sum_a P_a + \sum_a a P_a + \frac{\sum_a a P_a \sum_{a'} a' P_{a'}}{2} + \frac{\sum_a a P_a \sum_{a'} a' P_{a'} \sum_{a''} a'' P_{a''}}{3!} + \cdots \tag{49}$$
$$= \sum_a P_a + \sum_a a P_a + \frac{\sum_{a,a'} a a' P_a P_{a'}}{2} + \frac{\sum_{a,a',a''} a a' a'' P_a P_{a'} P_{a''}}{3!} + \cdots \tag{50}$$
$$= \sum_a P_a + \sum_a a P_a + \frac{\sum_a a^2 P_a}{2} + \frac{\sum_a a^3 P_a}{3!} + \cdots \tag{51}$$
$$= \sum_a (1 + a + \frac{a^2}{2} + \frac{a^3}{3!} + \cdots) P_a \tag{52}$$
$$= \sum_a e^a P_a. \tag{53}$$

Exercício: Verifique a equivalência entre as definições acima usando a série de Taylor para $\sqrt{A}$.

Exemplo de aplicação Considere a matrix densidade $\rho = \sum_r r P_r$, com P_r sendo projetores 1D. A entropia de von Neumann dessa matriz é definida e dada por:

$$S(\rho) = -Tr(\rho \log(\rho)) \tag{54}$$
$$= -Tr(\rho \log(\sum_r r P_r)) \tag{55}$$
$$= -Tr((\sum_{r'} r' P_{r'})(\sum_r \log(r) P_r)) \tag{56}$$
$$= -Tr(\sum_{r',r} r' \log(r) P_{r'} P_r) \tag{57}$$
$$= -Tr(\sum_{r',r} r' \log(r) \delta_{rr'} P_r) \tag{58}$$
$$= -\sum_r r \log(r) Tr(P_r) \tag{59}$$
$$= -\sum_r r \log(r) \sum_{r'} (|r'\rangle, P_r(|r'\rangle)) \tag{60}$$
$$= -\sum_r r \log(r) \sum_{r'} (|r'\rangle, \langle r|r'\rangle |r\rangle) \tag{61}$$
$$= -\sum_r r \log(r). \tag{62}$$

Exercício: Para $H = \sum_h hP_h$, com P_h um projetor 1D e $\beta \in \mathbb{R}$, calcule a expressão para o estado térmico de Gibbs:

$$\rho_g = \frac{e^{-\beta H}}{Z}. \tag{63}$$

Use $Tr(\rho_g) := 1$ para obter a expressão da função de partição, que é o escalar Z nessa equação.

1.1 Teorema (forma exponencial para operadores unitários)

Seja $H : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ um operador Hermitiano e $\theta \in \mathbb{R}$, então

$$U := e^{i\theta H} \tag{64}$$

é um operador unitário. ### Prova Se $H = \sum_h hP_h$. Então $i\theta H = \sum_h i\theta h P_h$. Assim

$$U = e^{i\theta H} = \sum_h e^{i\theta h} P_h \tag{65}$$

e

$$U^\dagger = \sum_h (e^{i\theta h})^* P_h^\dagger = \sum_h e^{-i\theta h} P_h. \tag{66}$$

Por conseguinte,

$$UU^\dagger = \sum_h e^{i\theta h} P_h \sum_{h'} e^{-i\theta h'} P_{h'} \tag{67}$$
$$= \sum_{h,h'} e^{i\theta(h-h')} P_h P_{h'} \tag{68}$$
$$= \sum_h P_h \tag{69}$$
$$= \mathbb{I}_{\mathcal{H}}, \tag{70}$$