05_composite

August 29, 2019

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

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

0.1 Espaços compostos

Para a descrição de sistemas constituídos por "muitas partículas", precisaremos do conceito de espaços compostos. Considere dois espaços de Hilbert $\mathcal{H}_a$ e $\mathcal{H}_b$ com bases respectivas $\{|a_j\rangle\}_{j=1}^{\dim\mathcal{H}_a}$ e $\{|b_j\rangle\}_{j=1}^{\dim\mathcal{H}_b}$. A composição dos dois espaços nos fornece um espaço de Hilbert "maior" denotado por

$$\mathcal{H}_{ab} = \mathcal{H}_a \otimes \mathcal{H}_b. \tag{1}$$

Uma base para o espaço composto pode ser obtida através do produto tensorial (ou produto de Kronecker ou produto direto) dos vetores das bases individuais:

$$|c_{jk}\rangle := |a_j\rangle \otimes |b_k\rangle, \tag{2}$$

para $j = 1, \cdots, \dim\mathcal{H}_a$ e $k = 1, \cdots, \dim\mathcal{H}_b$. O *produto tensorial* de duas matrizes A e B é definido como ilustrado no exemplo abaixo:

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} \\ A_{2,1} & A_{2,2} \end{bmatrix} \otimes B \tag{3}$$

$$:= \begin{bmatrix} A_{1,1}B & A_{1,2}B \\ A_{2,1}B & A_{2,2}B \end{bmatrix}. \tag{4}$$

Um elemento qualquer do produto tensorial pode ser escrito como [Arfken]:

$$(A \otimes B)_{d_a(i-1)+k, d_b(j-1)+l} = A_{i,j}B_{k,l}, \tag{5}$$

com $d_a := \dim\mathcal{H}_a$ e $d_b := \dim\mathcal{H}_b$.

Pode-se verificar que para quaisquer quatro matrizes A, B, C, D teremos que (está verificado abaixo):

$$(A \otimes B)(C \otimes D) = (AC) \otimes (BD). \tag{6}$$

Com isso vemos que o produto interno de dois elemento da "base composta" é dado por:

$$\langle c_{jk}|c_{lm}\rangle = (\langle a_j|\otimes\langle b_k|)(|a_l\rangle\otimes|b_m\rangle) \tag{7}$$
$$= \langle a_j|a_l\rangle\otimes\langle b_k|b_m\rangle = \delta_{j,l}\otimes\delta_{k,m} \tag{8}$$
$$= \delta_{j,l}\delta_{k,m}. \tag{9}$$

Por conseguinte, como os elementos de $\{|a_j\rangle\otimes|b_k\rangle\}$ são ortogonais com relação aos dois índices, vemos que

$$d_{ab} \equiv \dim\mathcal{H}_{ab} = d_a d_b. \tag{10}$$

```
In [11]: a,b,c,d,e,f,g,h = symbols("a b c d e f g h")
         A = Matrix([[a,b],[c,d]])
         B = Matrix([[e,f],[g,h]])
         tp(A,B)
```

```
Out[11]:
```

$$\begin{bmatrix} ae & af & be & bf \\ ag & ah & bg & bh \\ ce & cf & de & df \\ cg & ch & dg & dh \end{bmatrix}$$

0.1.1 Exemplo

Vamos considerar a base padrão para $\mathbb{C}^2$

$$|a_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, |a_2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{11}$$

Uma base para $\mathbb{C}^4 = \mathbb{C}^2\otimes\mathbb{C}^2$ é obtida como segue:

$$|c_{11}\rangle = |a_1\rangle\otimes|a_1\rangle = \begin{bmatrix} 1|a_1\rangle \\ 0|a_1\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{12}$$

$$|c_{12}\rangle = |a_1\rangle\otimes|a_2\rangle = \begin{bmatrix} 1|a_2\rangle \\ 0|a_2\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{13}$$

$$|c_{21}\rangle = |a_2\rangle\otimes|a_1\rangle = \begin{bmatrix} 0|a_1\rangle \\ 1|a_1\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{14}$$

$$|c_{22}\rangle = |a_2\rangle\otimes|a_2\rangle = \begin{bmatrix} 0|a_2\rangle \\ 1|a_2\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{15}$$

$$\tag{16}$$

Exercício: Uma base para $\mathbb{C}^{2x2}$ é

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, A_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, A_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, A_4 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{17}$$

Obtenha uma base para $\mathbb{C}^{4x4}$.

0.1.2 Propriedades do produto tensorial

Vamos começar verificando que para quaisquer matrizes A, B, C, D, com dimensões apropriadas para que as multiplicações matriciais envolvidas possam ser realizadas, teremos $(A \otimes B)(C \otimes D) = (AC \otimes BD)$. Faremos a verificação explícita

$$(A \otimes B)(C \otimes D) = \begin{bmatrix} A_{1,1}B & A_{1,2}B & \cdots \\ A_{2,1}B & A_{2,2}B & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{1,1}D & C_{1,2}D & \cdots \\ C_{2,1}D & C_{2,2}D & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \tag{18}$$

$$= \begin{bmatrix} (A_{1,1}BC_{1,1}D + A_{1,2}BC_{2,1}D + \cdots) & (A_{1,1}BC_{1,2}D + A_{1,2}BC_{2,2}D + \cdots) & \cdots \\ (A_{2,1}BC_{1,1}D + A_{2,2}BC_{2,1}D + \cdots) & (A_{2,1}BC_{1,2}D + A_{2,2}BC_{2,2}D + \cdots) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \tag{19}$$

$$= \begin{bmatrix} (A_{1,1}C_{1,1} + A_{1,2}C_{2,1} + \cdots)BD & (A_{1,1}C_{1,2} + A_{1,2}C_{2,2} + \cdots)BD & \cdots \\ (A_{2,1}C_{1,1} + A_{2,2}C_{2,1} + \cdots)BD & (A_{2,1}C_{1,2} + A_{2,2}C_{2,2} + \cdots)BD & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \tag{20}$$

$$= \begin{bmatrix} (A_{1,1}C_{1,1} + A_{1,2}C_{2,1} + \cdots) & (A_{1,1}C_{1,2} + A_{1,2}C_{2,2} + \cdots) & \cdots \\ (A_{2,1}C_{1,1} + A_{2,2}C_{2,1} + \cdots) & (A_{2,1}C_{1,2} + A_{2,2}C_{2,2} + \cdots) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \otimes BD \tag{21}$$

$$= AC \otimes BD. \tag{22}$$

0.2 Operadores positivos

Um operador linear $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ é dito positivo (positivo semidefinido, formalmente) se

$$\langle\psi|A|\psi\rangle \geq 0, \forall|\psi\rangle \in \mathcal{H}. \tag{23}$$

Quando essa condição é satisfeita, usamos a notação $A \geq_{\mathcal{H}}$.

Alguns resultados relevantes relacionados: 1. Se o operador A for positivo e normal, seus autovalores são não negativos pois

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|\sum_a aP_a|\psi\rangle \tag{24}$$

$$= \sum_a a\langle\psi|P_a|\psi\rangle = \sum_a a\langle\psi|\langle a|\psi\rangle|a\rangle \tag{25}$$

$$= \sum_a a|\langle a|\psi\rangle|^2 \geq 0. \tag{26}$$

E para garantir a não negatividade do "sanduíche", devemos ter $a \geq 0, \forall a$.

2. Para um operador linear qualquer $B : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, temos que $A := B^\dagger \circ B$ é um operador positivo pois

$$
\begin{aligned}
\langle\psi|A|\psi\rangle &= (|\psi\rangle, |A|\psi\rangle) && (27)\\
&= (|\psi\rangle, B^\dagger \circ B|\psi\rangle) && (28)\\
&= (B|\psi\rangle, B|\psi\rangle) && (29)\\
&\equiv (|\phi\rangle, |\phi\rangle) \geq 0. && (30)
\end{aligned}
$$

Exercício: Da mesma forma, verifique que $B \circ B^\dagger \geq {}_{\mathcal{H}}$.

3. Para $X, Y : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, ao escrevermos $X \geq Y$ queremos dizer que $A := X - Y \geq {}_{\mathcal{H}}$. Se definimos o "valor médio" como:

$$
\langle Z\rangle := \sum_j p_j \langle\psi_j|Z|\psi_j\rangle \tag{31}
$$

com $\{p_j\}$ sendo uma distribuição de probabilidades, i.e., $p_j \geq 0$ e $\sum_j p_j = 1$, e $\{|\psi_j\rangle\}$ é um conjunto de vetores quaisquer, teremos que $X \geq Y \Rightarrow \langle X\rangle \geq \langle Y\rangle$. Para verificar essa afirmação notemos que $X \geq Y \Rightarrow \langle\psi_j|(X-Y)|\psi_j\rangle \geq 0\ \forall|\psi_j\rangle$. Mas

$$
\begin{aligned}
\langle(X-Y)\rangle &= \sum_j p_j\langle\psi_j|(X-Y)|\psi_j\rangle = \sum_j p_j(\geq 0) \geq 0 && (32)\\
&= \sum_j p_j\langle\psi_j|X|\psi_j\rangle - \sum_j p_j\langle\psi_j|Y|\psi_j\rangle && (33)\\
&= \langle X\rangle - \langle Y\rangle. && (34)
\end{aligned}
$$

Portanto $\langle X\rangle - \langle Y\rangle \geq 0 \Rightarrow \langle X\rangle \geq \langle Y\rangle$.

0.3 Representação produto externo

Considere um operador linear $A : \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^n$ e uma base ortonormal $|\beta_j\rangle \in \mathbb{C}^n$. Podemos escrever a representação produto externo de A da seguinte forma:

$$
\begin{aligned}
A = \mathbb{I}_{\mathbb{C}^n} A \mathbb{I}_{\mathbb{C}^n} &= \sum_{j=1}^{n} |\beta_j\rangle\langle\beta_j| A \sum_{k=1}^{n} |\beta_k\rangle\langle\beta_k| && (35)\\
&= \sum_{j,k=1}^{n} \langle\beta_j|A|\beta_k\rangle |\beta_j\rangle\langle\beta_k|. && (36)
\end{aligned}
$$

OBS: Cada termo do tipo $|\beta_j\rangle\langle\beta_k|$ é chamado de produto externo, e é uma matriz nxn. Note que o projetor em $\mathbb{C}^n$ também é um produto externo, mas nesse caso temos um único vetor envolvido.

Exercício: Para o operador de inversão definido por $A|e_1\rangle = |e_2\rangle$ e $A|e_2\rangle = |e_1\rangle$, escreva sua representação produto externo (primeiramente com todos os termos, sejam eles nulos ou não).

Consideremos agora o espaço composto $\mathbb{C}^n \otimes \mathbb{C}^m$, um operador linear C neste espaço e duas bases ortonormais dos espaços individuais $\{|\alpha_j\rangle\}_{j=1}^n$ e $\{|\beta_k\rangle\}_{k=1}^m$. Analogamente ao que fizemos acima, podemos escrever a seguinte representação produto externo para C (**exercício**):

$$C = (\mathbb{I}_{\mathbb{C}^n} \otimes \mathbb{I}_{\mathbb{C}^m}) C (\mathbb{I}_{\mathbb{C}^n} \otimes \mathbb{I}_{\mathbb{C}^m}) \tag{37}$$

$$= \sum_{j,p=1}^{n} \sum_{k,q=1}^{m} (\langle \alpha_j | \otimes \langle \beta_k |) C (|\alpha_p\rangle \otimes |\beta_q\rangle) |\alpha_j\rangle\langle \alpha_p| \otimes |\beta_k\rangle\langle\beta_q|. \tag{38}$$

0.4 Função traço (propriedades)

O traço de um operador linear é a soma dos elementos na diagonal principal da matriz correspondente. Se a representação matricial é feita na base $\{|b_j\rangle\}_{j=1}^{d}$, então

$$Tr(A) = \sum_{j=1}^{d} A_{j,j} \equiv \sum_{j=1}^{d} \langle bj|A|b_j\rangle. \tag{39}$$

Algumas propriedades importante do traço são: 1. Propriedade cíclica: $Tr(AB) = Tr(BA)$ Para quais duas matrizes quadradas A e B teremos

$$Tr(AB) = \sum_{j=1}^{d} (AB)_{j,j} = \sum_{j=1}^{d} \sum_{k=1}^{d} A_{j,k} B_{k,j} \tag{40}$$

$$= \sum_{k=1}^{d} \sum_{j=1}^{d} B_{k,j} A_{j,k} = \sum_{k=1}^{d} (BA)_{k,k} \tag{41}$$

$$= Tr(BA). \tag{42}$$

2. Invariância por transformação de similaridade Ou seja, para U unitária (ou ortogonal) teremos $Tr(UAU^{\dagger}) = Tr(A)$:

$$Tr(UAU^{\dagger}) = Tr(U^{\dagger}UA) = Tr(\mathbb{I}A) \tag{43}$$

$$= Tr(A). \tag{44}$$

3. Invariância por escolha da base Ou seja, se $\{|b_j\rangle\}_{j=1}^{d}$ e $\{|a_j\rangle\}_{j=1}^{d}$ são duas bases ortonormais do espaço vetorial considerado, então $Tr(A) = \sum_{j=1}^{d} \langle bj|A|b_j\rangle = \sum_{j=1}^{d} \langle a_j|A|a_j\rangle$. Para fazer essa prova escrevemos $|a_j\rangle = \sum_{k=1}^{d} \langle b_k|a_j\rangle |b_k\rangle$:

$$\sum_{j=1}^{d}\langle a_j|A|a_j\rangle = \sum_{j=1}^{d}(\sum_{k=1}^{d}\langle b_k|a_j\rangle|b_k\rangle)^{\dagger}A\sum_{l=1}^{d}\langle b_l|a_j\rangle|b_l\rangle \tag{45}$$

$$= \sum_{j,k,l=1}^{d}\langle b_l|a_j\rangle\langle b_k|a_j\rangle^{*}\langle b_k|A|b_l\rangle \tag{46}$$

$$= \sum_{k,l=1}^{d}\langle b_l|(\sum_{j=1}^{d}|a_j\rangle\langle a_j|)|b_k\rangle\langle b_k|A|b_l\rangle \tag{47}$$

$$= \sum_{k,l=1}^{d}\langle b_l|\mathbb{I}|b_k\rangle\langle b_k|A|b_l\rangle \tag{48}$$

$$= \sum_{k,l=1}^{d}\delta_{l,k}\langle b_k|A|b_l\rangle \tag{49}$$

$$= \sum_{k=1}^{d}\langle b_k|A|b_k\rangle. \tag{50}$$

4. Traço do produto externo Vamos mostrar que para quaisquer dois vetores $|\eta\rangle, |\xi\rangle$ teremos $Tr(|\eta\rangle\langle\xi|) = \langle\xi|\eta\rangle$. Para isso usamos a invariância do traço por mudança de base para escolher uma base ortonormal que contenha um desses vetores. Por exemplo, usemos a base $\{|b_j\rangle\}_{j=1}^{d}$ com $|b_j\rangle = |\eta\rangle$. Assim

$$Tr(|\eta\rangle\langle\xi|) = \sum_{j=1}^{d}\langle bj|\eta\rangle\langle\xi|b_j\rangle = \sum_{j=1}^{d}\langle bj|b_1\rangle\langle\xi|b_j\rangle \tag{51}$$

$$= \sum_{j=1}^{d}\delta_{j,1}\rangle\langle\xi|b_j\rangle = \langle\xi|b_1\rangle \tag{52}$$

$$= \langle\xi|\eta\rangle. \tag{53}$$

0.5 Traço parcial

A função traço parcial é uma função matricial que leva operadores do espaço composto em operadores dos espaços individuais. Sejam $|\eta\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H}_a$ e $|\xi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}_b$ quaisquer vetores dos espaços vetoriais considerados. Podemos definir o traço parcial como uma função linear dada como segue [arXiv:1601.07458]:

$$Tr_b(|\eta\rangle\langle\chi|\otimes|\xi\rangle\langle\psi|) := |\eta\rangle\langle\chi|\otimes Tr(|\xi\rangle\langle\psi|) \tag{54}$$

$$= |\eta\rangle\langle\chi|\otimes\langle\psi|\xi\rangle \tag{55}$$

$$= \langle\psi|\xi\rangle|\eta\rangle\langle\chi|. \tag{56}$$

Se aplicamos essa definição no operador C,

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}_{\mathbb{C}^m}(C) &= \sum_{j,p=1}^{n}\sum_{k,q=1}^{m} ((\langle\alpha_j| \otimes \langle\beta_k|)C(|\alpha_p\rangle \otimes |\beta_q\rangle))|\alpha_j\rangle\langle\alpha_p| \otimes Tr(|\beta_k\rangle\langle\beta_q|) && (57)\\
&= \sum_{j,p=1}^{n}\sum_{k,q=1}^{m} ((\langle\alpha_j| \otimes \langle\beta_k|)C(|\alpha_p\rangle \otimes |\beta_q\rangle))|\alpha_j\rangle\langle\alpha_p| \otimes \langle\beta_q|\beta_k\rangle && (58)\\
&= \sum_{j,p=1}^{n}\sum_{k,q=1}^{m} ((\langle\alpha_j| \otimes \langle\beta_k|)C(|\alpha_p\rangle \otimes |\beta_q\rangle))|\alpha_j\rangle\langle\alpha_p| \otimes \delta_{q,k} && (59)\\
&= \sum_{j,p=1}^{n}\sum_{k=1}^{m} ((\langle\alpha_j| \otimes \langle\beta_k|)C(|\alpha_p\rangle \otimes |\beta_k\rangle))|\alpha_j\rangle\langle\alpha_p| && (60)\\
&=: \sum_{j,p=1}^{n} A_{j,p}|\alpha_j\rangle\langle\alpha_p|. && (61)
\end{aligned}$$

Ou seja, $\mathrm{Tr}_{\mathbb{C}^m}$ leva operadores definidos em $\mathbb{C}^n \otimes \mathbb{C}^m$ em operadores de $\mathbb{C}^n$.

Exemplo Seja $|e_1\rangle, |e_2\rangle \in \mathbb{C}^2$ uma base ortonormal. Levando em conta que para quaisquer duas matrizes A, B teremos $(A \otimes B)^\dagger = A^\dagger \otimes B^\dagger$. Consideremos o projetor no vetor $|\Psi\rangle = |e_1\rangle \otimes |e_2\rangle - |e_2\rangle \otimes |e_1\rangle$ de :

$$\begin{aligned}
P_\Psi &= |\Psi\rangle\langle\Psi| = |\Psi\rangle|\Psi\rangle^\dagger && (62)\\
&= (|e_1\rangle \otimes |e_2\rangle - |e_2\rangle \otimes |e_1\rangle)(|e_1\rangle \otimes |e_2\rangle - |e_2\rangle \otimes |e_1\rangle)^\dagger && (63)\\
&= (|e_1\rangle \otimes |e_2\rangle - |e_2\rangle \otimes |e_1\rangle)((|e_1\rangle \otimes |e_2\rangle)^\dagger - (|e_2\rangle \otimes |e_1\rangle)^\dagger) && (64)\\
&= (|e_1\rangle \otimes |e_2\rangle - |e_2\rangle \otimes |e_1\rangle)((|e_1\rangle)^\dagger \otimes (|e_2\rangle)^\dagger - (|e_2\rangle)^\dagger \otimes (|e_1\rangle)^\dagger) && (65)\\
&= (|e_1\rangle \otimes |e_2\rangle - |e_2\rangle \otimes |e_1\rangle)(\langle e_1| \otimes \langle e_2| - \langle e_2| \otimes \langle e_1|) && (66)\\
&= |e_1\rangle\langle e_1| \otimes |e_2\rangle\langle e_2| - |e_1\rangle\langle e_2| \otimes |e_2\rangle\langle e_1| - |e_2\rangle\langle e_1| \otimes |e_1\rangle\langle e_2| + |e_2\rangle\langle e_2| \otimes |e_1\rangle\langle e_1|. && (67)
\end{aligned}$$

Agora tomamos o traço parcial sobre o espaço da "direita":

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}_d(P_\Psi) &= |e_1\rangle\langle e_1| \otimes \langle e_2|e_2\rangle - |e_1\rangle\langle e_2| \otimes \langle e_1|e_2\rangle - |e_2\rangle\langle e_1| \otimes \langle e_2|e_1\rangle + |e_2\rangle\langle e_2| \otimes \langle e_1|e_1\rangle && (68)\\
&= |e_1\rangle\langle e_1| + |e_2\rangle\langle e_2| && (69)\\
&= \mathbb{I}_{\mathbb{C}^2}. && (70)
\end{aligned}$$

Exercício: Calcule o traço parcial aplicado ao espaço da "esquerda" do projetor no vetor $|\Phi\rangle = |e_1\rangle \otimes |e_1\rangle + |e_2\rangle \otimes |e_2\rangle$.

0.6 Transposta parcial

Por definição, os elementos da representação matricial de um operador linear A em uma base ortonormal $\{|\alpha_j\rangle\}$ e a matriz transposta associada são relacionados por

$$\langle\alpha_j|A^T|\alpha_k\rangle = \langle\alpha_k|A|\alpha_j\rangle. \quad (71)$$

Para $c_{j,k}$ escalares, podemos obter essa mesma relação definindo a transposta via o seguinte mapa linear [arXiv:1609.00323]:

$$T(\sum_{j,k} c_{j,k}|\alpha_j\rangle\langle\alpha_k|) := \sum_{j,k} c_{j,k} T(|\alpha_j\rangle\langle\alpha_k|) := \sum_{j,k} c_{j,k}|\alpha_k\rangle\langle\alpha_j|. \tag{72}$$

Para verificar essa afirmação, consideramos a representação produto externo $A = \sum_{j,k}\langle\alpha_j|A|\alpha_k\rangle|\alpha_j\rangle\langle\alpha_k|$ e atuamos essa função:

$$\begin{aligned} T(A) &= T(\sum_{j,k}\langle\alpha_j|A|\alpha_k\rangle|\alpha_j\rangle\langle\alpha_k|) && (73)\\ &= \sum_{j,k}\langle\alpha_j|A|\alpha_k\rangle T(|\alpha_j\rangle\langle\alpha_k|) && (74)\\ &= \sum_{j,k}\langle\alpha_j|A|\alpha_k\rangle|\alpha_k\rangle\langle\alpha_j|. && (75)\end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{aligned} \langle\alpha_p|T(A)|\alpha_q\rangle &= \sum_{j,k}\langle\alpha_j|A|\alpha_k\rangle\langle\alpha_p|\alpha_k\rangle\langle\alpha_j|\alpha_q\rangle && (76)\\ &= \sum_{j,k}\langle\alpha_j|A|\alpha_k\rangle\delta_{p,k}\delta_{j,q} && (77)\\ &= \langle\alpha_q|A|\alpha_p\rangle. && (78)\end{aligned}$$

OBS: Vimos que os autovalores da transposta são iguais aos autovalores da matriz original. Então, pelo motivo da transposta levar matrizes positivas em matrizes positivas, dizemos que ela é uma mapa positivo. Ou seja,

$$T(A) \geq _{\mathcal{H}} \forall A \geq _{\mathcal{H}}. \tag{79}$$

Quando aplicamos a um sistema composto, a função matricial **transposta parcial** é definida, quando aplicada ao espaço da "esquerda", como

$$\begin{aligned} T_e(C) &:= T\otimes id(C) && (80)\\ &= \sum_{j,p=1}^{n}\sum_{k,q=1}^{m}((\langle\alpha_j|\otimes\langle\beta_k|)C(|\alpha_p\rangle\otimes|\beta_q\rangle))T(|\alpha_j\rangle\langle\alpha_p|)\otimes id(|\beta_k\rangle\langle\beta_q|) && (81)\\ &:= \sum_{j,p=1}^{n}\sum_{k,q=1}^{m}((\langle\alpha_j|\otimes\langle\beta_k|)C(|\alpha_p\rangle\otimes|\beta_q\rangle))|\alpha_p\rangle\langle\alpha_j|)\otimes|\beta_k\rangle\langle\beta_q|. && (82)\end{aligned}$$

E assim (**exercício**)

$$((\langle\alpha_r|\otimes\langle\beta_s|)T_e(C)(|\alpha_t\rangle\otimes|\beta_u\rangle) = ((\langle\alpha_t|\otimes\langle\beta_s|)T_e(C)(|\alpha_r\rangle\otimes|\beta_u\rangle)). \tag{83}$$

Dizemos que um mapa positivo M é **completamente positivo** se $M\otimes id(C) \geq \ \forall C \geq$. Uma propriedade importante da transposta é que esta função não é um mapa completamente positivo. Para verificar essa afirmação, consideremos

$$T_e(P_\Psi) = T(|e_1\rangle\langle e_1|)\otimes id(|e_2\rangle\langle e_2|) - T(|e_1\rangle\langle e_2|)\otimes id(|e_2\rangle\langle e_1|) - T(|e_2\rangle\langle e_1|)\otimes id(|e_1\rangle\langle e_2|) + T(|e_2\rangle\langle e_2|)\otimes id(|e_1\rangle\langle e \tag{84}$$

$$= |e_1\rangle\langle e_1|\otimes|e_2\rangle\langle e_2| - |e_2\rangle\langle e_1|\otimes|e_2\rangle\langle e_1| - |e_1\rangle\langle e_2|)\otimes|e_1\rangle\langle e_2| + |e_2\rangle\langle e_2|\otimes|e_1\rangle\langle e_1| \tag{85}$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{86}$$

com a representação matricial feita usando a base $\{|e_1\rangle\otimes|e_1\rangle, |e_1\rangle\otimes|e_2\rangle, |e_2\rangle\otimes|e_1\rangle, |e_2\rangle\otimes|e_2\rangle\}$. Para exemplificar o cálculo dos elementos de matrix, usemos $(A\otimes B)(C\otimes D) = AC\otimes BD$ e consideremos explicitamente

$$(\langle e_1|\otimes\langle e_1|)T_e(P_\Psi)(|e_1\rangle\otimes|e_1\rangle) = (\langle e_1|\otimes\langle e_1|)(|e_1\rangle\langle e_1|\otimes|e_2\rangle\langle e_2|)(|e_1\rangle\otimes|e_1\rangle) - (\langle e_1|\otimes\langle e_1|)(|e_2\rangle\langle e_1|\otimes|e_2\rangle\langle e_1|)(|e_1 \tag{87}$$

$$- (\langle e_1|\otimes\langle e_1|)(|e_1\rangle\langle e_2|)\otimes|e_1\rangle\langle e_2|)(|e_1\rangle\otimes|e_1\rangle) + (\langle e_1|\otimes\langle e_1|)(|e_2\rangle\langle e_2|\otimes|e_1\rangle\langle e_1|) \tag{88}$$

$$= \langle e_1|e_1\rangle\langle e_1|e_1\rangle\otimes\langle e_1|e_2\rangle\langle e_2|e_1\rangle - \langle e_1|e_2\rangle\langle e_1|e_1\rangle\otimes\langle e_1|e_2\rangle\langle e_1||e_1\rangle \tag{89}$$

$$- \langle e_1|e_1\rangle\langle e_2|e_1\rangle\otimes\langle e_1|e_1\rangle\langle e_2|e_1\rangle + \langle e_1|e_2\rangle\langle e_2|e_1\rangle\otimes\langle e_1|e_1\rangle\langle e_1|e_1\rangle \tag{90}$$

$$= 0. \tag{91}$$

Como pode ser visto abaixo, $T_e(P_\Psi)$ possui um autovalor negativo equanto que os autovalores de P_Ψ são todos positivos ou nulos.

Exercício: Calcule os autovalores de P_Φ e de $T_d(P_\Phi)$, usando expansão em cofatores para o determinante.

In [18]:
```
# pra T_{e}(P_{Psi})
A=Matrix([[0,0,0,-1],[0,1,0,0],[0,0,1,0],[-1,0,0,0]])
#A
A.eigenvects()
```

Out[18]:

$$\left[\left(-1, \quad 1, \quad \left[\begin{bmatrix}1\\0\\0\\1\end{bmatrix}\right]\right), \quad \left(1, \quad 3, \quad \left[\begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}-1\\0\\0\\1\end{bmatrix}\right]\right)\right]$$

In [19]:
```
# pra P_{Psi}
A=Matrix([[0,0,0,0],[0,1,1,0],[0,1,1,0],[0,0,0,0]])
#A
A.eigenvects()
```

Out[19]:

$$\left[\left(0,\quad 3,\quad \left[\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix},\ \begin{bmatrix}0\\-1\\1\\0\end{bmatrix},\ \begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}\right]\right),\ \left(2,\quad 1,\quad \left[\begin{bmatrix}0\\1\\1\\0\end{bmatrix}\right]\right)\right]$$

0.6.1 Inversa do produto

Consideremos duas matrizes quadradas A e B invertíveis. Teremos assim que

$$(AB)^{-1}(AB) = \mathbb{I} \Rightarrow (AB)^{-1}ABB^{-1} = \mathbb{I}B^{-1} \tag{92}$$
$$\Rightarrow (AB)^{-1}A\mathbb{I}A^{-1} = B^{-1}A^{-1} \Rightarrow (AB)^{-1}\mathbb{I} = B^{-1}A^{-1}. \tag{93}$$

Ou seja,

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}. \tag{94}$$

0.7 Teorema (decomposição polar)

Para uma matriz quadrada qualquer A, podemos escrever

$$A = UJ = KV, \tag{95}$$

com U e V sendo matrizes unitárias e $J = \sqrt{A^\dagger A}$ e $K = \sqrt{AA^\dagger}$ são matrizes positivas. Além disso, se existir a inversa de A, então $U = AJ^{-1}$.

0.7.1 Prova

Vamos provar esse resultando mostrando que a ação de A e de UJ é a mesma, para a definição conveniente de U. Como J é positiva, podemos escrever a decomposição espectral $J = \sum_j \lambda_j |j\rangle\langle j|$. Vamos definir a ação de A nos autovetores de J como segue:

$$A|j\rangle =: |\psi_j\rangle. \tag{96}$$

Agora, de $A^\dagger A = (UJ)^\dagger(UJ) = J^\dagger U^\dagger UJ = J^2$ vem que

$$(|\psi_j\rangle, |\psi_k\rangle) = (A|j\rangle, A|k\rangle) = (A^\dagger A|j\rangle, |k\rangle) \tag{97}$$
$$= (J^2|j\rangle, |k\rangle) = (\lambda_j^2|j\rangle, |k\rangle) = \lambda_j^2(|j\rangle, |k\rangle) \tag{98}$$
$$= \lambda_j^2\delta_{j,k}. \tag{99}$$

Então, para $\lambda_j > 0$ podemos definir o seguinte conjunto ortonormal de vetores:

$$|e_j\rangle := \frac{|\psi_j\rangle}{||\psi_j||} = \frac{|\psi_j\rangle}{\sqrt{\langle\psi_j|\psi_j\rangle}} = \frac{|\psi_j\rangle}{\lambda_j}. \tag{100}$$

Podemos aplicar o procedimento de Gram-Schmidt para completar a base ortonormal $|e_j\rangle$ usando vetores LI no subespaço gerado pelo autovetores de J correspondentes a $\lambda_j = 0$. Tendo essa base, definimos o operador unitário

$$U := \sum_j |e_j\rangle\langle j|. \tag{101}$$

Exercício: Verificar que esse operador é unitário.

Agora, para a ação dos operadores, teremos

$$\lambda_j > 0 : \tag{102}$$
$$UJ|j\rangle = \sum_k |e_k\rangle\langle k|\lambda_j|j\rangle = \lambda_j \sum_k |e_k\rangle\langle k|j\rangle = \lambda_j|e_j\rangle = |\psi_j\rangle. \tag{103}$$
$$\lambda_j = 0 : \tag{104}$$
$$UJ|j\rangle = U\lambda_j|j\rangle = U0|j\rangle = |\oslash\rangle = |\psi_j\rangle, \tag{105}$$
$$\tag{106}$$

pois $\langle\psi_j|\psi_j\rangle = \lambda_j^2 = 0 \Rightarrow |\psi_j\rangle = |\oslash\rangle$.

Exercício: Verificar que se J é uma matriz positiva e U é uma matriz unitária, então $UJU^\dagger$ também é uma matriz positiva. **Exercício:** Prove a decomposição polar direita $A = KV$.

Vamos assumir agora que $\det(A) \neq 0$. Assim teremos que

$$A^{-1}A = (UJ)^{-1}(UJ) = J^{-1}U^{-1}UJ = J^{-1}\mathbb{I}J \tag{107}$$
$$= J^{-1}J = \mathbb{I}. \tag{108}$$

Vemos assim que se A possui inversa, então J também possui inversa. Agora, de $A = UJ$ temos $AJ^{-1} = UJJ^{-1}$ e

$$U = AJ^{-1}. \tag{109}$$

Concluimos assim a prova do teorema.

0.8 Teorema (decomposição em valores singulares)

Para qualquer matriz A, existem matrizes unitárias U e W e uma matriz positiva D diagonal na base padrão $\{|c_j\rangle\}$ tais que

$$A = UDW. \tag{110}$$

0.8.1 Prova

Pela decomposição polar, temos que $A = SJ$ com $J = \sqrt{A^\dagger A}$ e $S^\dagger = S^{-1}$. Agora, usamos uma matriz unitária W que leva os autovetores de $J = \sum_j \lambda_j|j\rangle\langle j|$ em vetores da base padrão $\{|c_j\rangle\}$, i.e., $W = \sum_k |c_k\rangle\langle k| \Rightarrow W|j\rangle = |c_j\rangle$ e

$$D := WJW^\dagger = \sum_j \lambda_j W|j\rangle\langle j|W^\dagger =: \sum_j \lambda_j|c_j\rangle\langle c_j|. \tag{111}$$

Assim $W^\dagger D W = W^\dagger W J W^\dagger W = J$ e

$$A = SJ = SW^\dagger DW =: UDW, \tag{112}$$

completando assim a prova do teorema.

Exercício: Verifique que o adjunto de uma matriz unitária é uma matriz unitária. **Exercício:** Verifique que o produto de duas matrizes unitárias é uma matriz unitária.

0.9 Teorema (decomposição de Schmidt)

Consideremos um vetor qualquer de $mathcal H_a \otimes \mathcal{H}_b$:

$$|\Psi\rangle = \sum_{j,k} c_{j,k} |\alpha_j\rangle \otimes |\beta_k\rangle, \tag{113}$$

decomposto em uma base composta ortonormal (aqui temos $\dim \mathcal{H}_a \dim \mathcal{H}_b$ coeficientes não nulos). Existem bases ortonormais dos espaços individuais tais que

$$|\Psi\rangle = \sum_{j} d_j |\tilde{\alpha}_j\rangle \otimes |\tilde{\beta}_j\rangle, \tag{114}$$

em que d_j são os chamados coeficientes de Schmidt (aqui temos $\min(\dim \mathcal{H}_a, \dim \mathcal{H}_b)$ coeficientes não nulos).

0.9.1 Prova

Usamos a decomposição em valores singulares para escrever a matriz de coeficientes

$$c_{j,k} = (UDV)_{j,k} = \sum_l (UD)_{j,l} V_{l,k} = \sum_{l,m} U_{j,m} D_{m,l} V_{l,k} \tag{115}$$

$$=: \sum_{l,m} U_{j,m} d_l \delta_{l,m} V_{l,k} = \sum_l U_{j,l} d_l V_{l,k}. \tag{116}$$

Assim

$$|\Psi\rangle = \sum_{j,k} \sum_l U_{j,l} d_l V_{l,k} |\alpha_j\rangle \otimes |\beta_k\rangle \tag{117}$$

$$= \sum_l d_l \sum_j U_{j,l} |\alpha_j\rangle \otimes \sum_k V_{l,k} |\beta_k\rangle \tag{118}$$

$$=: \sum_l d_l |\tilde{\alpha}_l\rangle \otimes |\tilde{\beta}_l\rangle. \tag{119}$$

Vamos verificar a ortonormalidade das bases que definimos. Teremos

$$\begin{aligned}
\langle\tilde{\alpha}_j|\tilde{\alpha}_k\rangle &= |\tilde{\alpha}_j\rangle^\dagger|\tilde{\alpha}_k\rangle && (120)\\
&= \sum_p U^*_{p,j}|\alpha_p\rangle^\dagger \sum_q U_{q,k}|\alpha_q\rangle && (121)\\
&= \sum_{p,q} U^*_{p,j}U_{q,k}\langle\alpha_p|\alpha_q\rangle && (122)\\
&= \sum_{p,q} U^*_{p,j}U_{q,k}\delta_{p,q} && (123)\\
&= \sum_p (U^\dagger)_{j,p}U_{p,k} && (124)\\
&= (U^\dagger U)_{j,k} = \delta_{j,k}. && (125)
\end{aligned}$$

Exercício: Verifique que $\{|\tilde{\beta}_k\rangle\}$ é uma base ortonormal. Com isso, completamos a prova desse teorema.

0.9.2 Obtendo a decomposição de Schmidt

Para $|\Psi\rangle = \sum_j d_j|\tilde{\alpha}_j\rangle \otimes |\tilde{\beta}_j\rangle$, teremos (**exercício**):

$$P_\Psi = \sum_{j,k} d_j d_k |\tilde{\alpha}_j\rangle\langle\tilde{\alpha}_k| \otimes |\tilde{\beta}_j\rangle\langle\tilde{\beta}_k|. \tag{126}$$

Tomando o traço parcial sobre o sub-sistema da direita teremos

$$\begin{aligned}
E := Tr_d(P_\Psi) &= \sum_{j,k} d_j d_k |\tilde{\alpha}_j\rangle\langle\tilde{\alpha}_k| \otimes Tr(|\tilde{\beta}_j\rangle\langle\tilde{\beta}_k|) && (127)\\
&= \sum_{j,k} d_j d_k |\tilde{\alpha}_j\rangle\langle\tilde{\alpha}_k| \otimes \langle\tilde{\beta}_k|\tilde{\beta}_j\rangle = \sum_{j,k} d_j d_k |\tilde{\alpha}_j\rangle\langle\tilde{\alpha}_k| \otimes \delta_{k,j} && (128)\\
&= \sum_j d_j^2 |\tilde{\alpha}_j\rangle\langle\tilde{\alpha}_j|. && (129)
\end{aligned}$$

Exercício: Verifique que $D := Tr_e(P_\Psi) = \sum_j d_j^2|\tilde{\beta}_j\rangle\langle\tilde{\beta}_j|$.

Com isso, teremos o seguinte *algoritmo* para calcular a decomposição de Schmidt de um vetor $|\Psi\rangle$ qualquer de um espaço composto $\mathcal{H}_a \otimes \mathcal{H}_b$: 1. Calcule o projetor $|\Psi\rangle\langle\Psi|$. 2. Obtenha as decomposições espectrais de $E := Tr_e(P_\Psi)$ e de $D := Tr_d(P_\Psi)$. 3. Os coeficientes de Schmidt são as raízes quadradas dos autovalores desses operadores (que possuem o mesmo espectro). As bases $\{|\tilde{\alpha}_j\rangle\}$ e $\{|\tilde{\beta}_j\rangle\}$ são as bases de autovetores de E e de D, respectivamente.

OBS: Se as dimensões dos espaços forem diferentes, a soma vai até a menor dimensão, e o outro operador "local" deve necessariamente ter autovalores nulos (com degenerescência igual ou maior que a diferença entre as dimensões).