04_functions

September 16, 2019

0.1 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 e a norma. 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 a se fazer aqui é que nossa intuição de como aplicar funções matriciais em matrizes está, em geral, errada, ou seja, se $A = (A_{j,k})$, em geral a função da matriz não é obtida aplicando-a em cada um dos elementos da matriz, i.e.,

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

1.1 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 $A \circ A \circ \cdots$ por j vezes.

1.1.1 Exemplo: $e^{i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma}} = \sigma_0 \cos\theta + i\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\sin\theta$

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

$$\vec{n}\cdot\vec{\sigma} = \vec{n}^T\vec{\sigma} := \begin{bmatrix} n_1 & n_2 & n_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \end{bmatrix} = \sum_{j=1}^{3} n_j\sigma_j. \tag{4}$$

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

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

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 $(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^2 = \sigma_0$ para obter:

$$
\begin{aligned}
e^{i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma}} &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^j}{j!} && (11)\\
&= \sigma_0 + i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma} + \frac{(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^2}{2!} + \frac{(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^3}{3!} + \frac{(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^4}{4!} + \frac{(i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma})^5}{5!} + \cdots && (12)\\
&= \sigma_0 + i\theta\vec{n}\cdot\vec{\sigma} - \frac{\theta^2\sigma_0}{2!} - \frac{i\theta^3\vec{n}\cdot\vec{\sigma}}{3!} + \frac{\theta^4\sigma_0}{4!} + \frac{i\theta^5\vec{n}\cdot\vec{\sigma}}{5!} + \cdots && (13)\\
&= \sigma_0(1 - \frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} - \cdots) + i\vec{n}\cdot\vec{\sigma}(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} - \cdots) && (14)\\
&= \sigma_0\cos\theta + i\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\sin\theta. && (15)
\end{aligned}
$$

1.2 Fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff

Para $c \in \mathbb{C}$ e $A, B : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ segue que

$$
e^{cB}Ae^{-cB} = A + c[B,A] + \frac{c^2}{2!}[B,[B,A]] + \frac{c^3}{3!}[B,[B,[B,A]]] + \cdots. \qquad (16)
$$

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

$$
\begin{aligned}
e^{cB}Ae^{-cB} &= \left(\sum_{j=0}^{\infty}\frac{(cB)^j}{j!}\right) A \left(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-cB)^k}{k!}\right) && (17)\\
&= \left(\mathbb{I} + cB + \frac{c^2B^2}{2} + \frac{c^3B^3}{3!} + \cdots\right) A \left(\mathbb{I} - cB + \frac{c^2B^2}{2} - \frac{c^3B^3}{3!} + \cdots\right) && (18)\\
&= A + cBA - cAB + \frac{c^2B^2}{2}A + A\frac{c^2B^2}{2} - \frac{2}{2}cBAcB - \frac{c^2B^2}{2}AcB + cBA\frac{c^2B^2}{2} + \frac{c^3B^3}{3!}A - A\frac{c^3B^3}{3!} + \cdots && (19)\\
&= A + c[B,A] + \frac{c^2}{2}(BBA + ABB - 2BAB) + \frac{c^3}{3!}(BBBA - ABBB + 3BABB - 3BBAB) + \cdots && (20)\\
&= A + c[B,A] + \frac{c^2}{2}(B(BA - AB) + (AB - BA)B) + \frac{c^3}{3!}(BB(BA - AB) - (AB - BA)BB + 2B(ABB - B && (21)\\
&= A + c[B,A] + \frac{c^2}{2}(B[B,A] - [B,A]B) + \frac{c^3}{3!}(BB[B,A] + [B,A]BB - 2B[B,A]B)) + \cdots && (22)\\
&= A + c[B,A] + \frac{c^2}{2}[B,[B,A]] + \frac{c^3}{3!}(B(B[B,A] - [B,A]B) + ([B,A]B - B[B,A])B) + \cdots && (23)\\
&= A + c[B,A] + \frac{c^2}{2}[B,[B,A]] + \frac{c^3}{3!}(B[B,[B,A]] - [B,[B,A]B) + \cdots && (24)\\
&= A + c[B,A] + \frac{c^2}{2!}[B,[B,A]] + \frac{c^3}{3!}[B,[B,[B,A]]] + \cdots . && (25)
\end{aligned}
$$

1.2.1 Exemplo

Para

$$A = \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \text{ e } B = \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \tag{26}$$

temos

$$[\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y \text{ e } [\sigma_z, \sigma_y] = -2i\sigma_x. \tag{27}$$

Assim

$$
\begin{aligned}
e^{c\sigma_z}\sigma_x e^{-c\sigma_z} &= \sigma_x + c[\sigma_z,\sigma_x] + \frac{c^2}{2}[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_x]] + \frac{c^3}{3!}[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_x]]] && (28)\\
&+ \frac{c^4}{4!}[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_x]]]] + \frac{c^5}{5!}[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_x]]]]] + \cdots && (29)\\
&= \sigma_x + c2i\sigma_y + \frac{c^2}{2}2i[\sigma_z,\sigma_y] + \frac{c^3}{3!}2i[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_y]] + \frac{c^4}{4!}2i[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_y]]] + \frac{c^5}{5!}2i[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_y]]]] + \cdots && (30)\\
&= \sigma_x + c2i\sigma_y - \frac{c^2}{2}4i^2\sigma_x - \frac{c^3}{3!}4i^2[\sigma_z,\sigma_x] - \frac{c^4}{4!}4i^2[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_x]] - \frac{c^5}{5!}4i^2[\sigma_z,[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_x]]] + \cdots && (31)\\
&= \sigma_x + c2i\sigma_y - \frac{(2ic)^2}{2}\sigma_x - \frac{c^3}{3!}8i^3\sigma_y - \frac{c^4}{4!}8i^3[\sigma_z,\sigma_y] - \frac{c^5}{5!}8i^3[\sigma_z,[\sigma_z,\sigma_y]] + \cdots && (32)\\
&= \sigma_x + c2i\sigma_y - \frac{(2ic)^2}{2}\sigma_x - \frac{c^3}{3!}8i^3\sigma_y + \frac{c^4}{4!}16i^4\sigma_x + \frac{c^5}{5!}16i^4[\sigma_z,\sigma_x] + \cdots && (33)\\
&= \sigma_x + c2i\sigma_y - \frac{(2ic)^2}{2}\sigma_x - \frac{(2ic)^3}{3!}\sigma_y + \frac{(2ic)^4}{4!}\sigma_x + \frac{(2ic)^5}{5!}\sigma_y + \cdots && (34)\\
&= \sigma_x\left(1 - \frac{(2ic)^2}{2!} + \frac{(2ic)^4}{4!} + \cdots\right) + \sigma_y\left(2ci - \frac{(2ic)^3}{3!} + \frac{(2ic)^5}{5!} + \cdots\right) && (35)\\
&= \sigma_x\cos(2ic) + \sigma_y\sin(2ic). && (36)
\end{aligned}
$$

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

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

Se

$$A = \sum_a a P_a \tag{37}$$

é a decomposição espectral do operador linear normal A, então suas funções podem ser calculadas usando

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

Ou seja, depois de obter a decomposição espectral de A, atuamos a função nos seus autovalores.

2.1 Equivalência entre as definições para $A = A^\dagger$

Vamos verificar que essa definição é equivalente à definição principal via séries de Taylor. 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

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

teremos que

$$
\begin{aligned}
f(A) = \sum_{j=0}^{\infty} c_jA^j &= \sum_{j=0}^{\infty} c_j \sum_a a^jP_a = \sum_a \left(\sum_{j=0}^{\infty} c_ja^j\right) P_a && (43)\\
&= \sum_a f(a)P_a. && (44)
\end{aligned}
$$

2.1.1 Exemplo

$$
\begin{aligned}
e^A &= \mathbb{I}_{\mathcal{H}} + A + \frac{A^2}{2} + \frac{A^3}{3!} + \cdots && (45)\\
&= \sum_a P_a + \sum_a aP_a + \frac{\sum_a aP_a \sum_{a'} a'P_{a'}}{2} + \frac{\sum_a aP_a \sum_{a'} a'P_{a'} \sum_{a''} a''P_{a''}}{3!} + \cdots && (46)\\
&= \sum_a P_a + \sum_a aP_a + \frac{\sum_{a,a'} aa'P_aP_{a'}}{2} + \frac{\sum_{a,a',a''} aa'a''P_aP_{a'}P_{a''}}{3!} + \cdots && (47)\\
&= \sum_a P_a + \sum_a aP_a + \frac{\sum_a a^2P_a}{2} + \frac{\sum_a a^3P_a}{3!} + \cdots && (48)\\
&= \sum_a (1 + a + \frac{a^2}{2} + \frac{a^3}{3!} + \cdots)P_a && (49)\\
&= \sum_a e^aP_a. && (50)
\end{aligned}
$$

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

```
In [2]: %run 03_operators.ipynb
```

```
In [7]: def mat_sqrt(A):
            eig = A.eigenvects()
            d = A.shape[0]
            Asqrt = zeros(d,d)
            ne = 0
            j = 0
            lk = 0
            while ne < d:
                mult = eig[j][1] # multiplicidade
                ne += mult # número de autovalores considerados
                for k in range(0,mult):
```

```
                Proj = proj(eig[j][2][k])
                Asqrt += sqrt(eig[j][0])*(Proj/trace(Proj))
            j += 1
        return Asqrt
```

```
In [12]: A = pauli(1)
         #a,b,c,d = symbols("a b c d")
         #A = Matrix([[a,b],[c,d]])
         mat_sqrt(A)
```

Out[12]:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} + \frac{i}{2} & \frac{1}{2} - \frac{i}{2} \\ \frac{1}{2} - \frac{i}{2} & \frac{1}{2} + \frac{i}{2} \end{bmatrix}$$

Exercício: Adapte o código acima para calcular a exponencial de um operador normal.

2.2 Exemplo de aplicação: Entropia de von Neumann

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

$$S(\rho) = -Tr(\rho \log_2(\rho)) = -Tr\left(\rho \log_2\left(\sum_r rP_r\right)\right) = -Tr\left(\left(\sum_{r'} r'P_{r'}\right)\left(\sum_r \log_2(r)P_r\right)\right) \quad (51)$$

$$= -Tr\left(\sum_{r',r} r' \log_2(r)P_{r'}P_r\right) = -Tr\left(\sum_{r',r} r' \log_2(r)\delta_{rr'}P_r\right) = -\sum_r r\log_2(r)Tr(P_r) \quad (52)$$

$$= -\sum_r r\log_2(r)\sum_{r'}(|r'\rangle, P_r(|r'\rangle)) = -\sum_r r\log_2(r)\sum_{r'}(|r'\rangle, \langle r|r'\rangle|r\rangle) \quad (53)$$

$$= -\sum_r r\log_2(r)\sum_{r'}\delta_{r,r'}(|r'\rangle, |r\rangle) = -\sum_r r\log_2(r)\langle r|r\rangle \quad (54)$$

$$= -\sum_r r\log_2(r), \quad (55)$$

que é a chamada entropia de Shannon da distribuição de probabilidades $\{r\}$ (os autovalores de ρ).

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:

$$\rho_g = \frac{e^{-\beta H}}{Z}. \quad (56)$$

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

```
In [13]: # Outside this function, initialize: evals = zeros(d,1)
         def eVals(A):
             d = A.shape[0]
             eig = A.eigenvects()
             ne = 0
             j = 0
```

```
        lk = 0
        while ne < d:
            mult = eig[j][1]
            ne += mult
            nk = lk + mult
            for k in range(lk,nk):
                evals[k] = eig[j][0]
            lk = nk
            j += 1
        return evals
```

```
In [14]: def shannon(pv):
             d = pv.shape[0]
             H = 0
             for j in range(d):
                 if pv[j] > 1.e-15 and pv[j] < (1.0-1.e-15):
                     H -= pv[j]*log(pv[j],2)
             return H
```

```
In [15]: def von_neumann(rho):
             d = rho.shape[0]
             evals = zeros(d,1)
             evals = eVals(rho)
             return shannon(evals)
```

```
In [27]: rho = Matrix([[1/2,0],[0,1/2]])
         evals = zeros(rho.shape[0],1)
         von_neumann(rho)
         #float(von_neumann(rho))
```

Out[27]:

$$\frac{0.693147180559945}{\log{(2)}}$$

2.3 Teorema (forma exponencial para operadores unitários)

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

$$U := e^{i\theta H} \tag{57}$$

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

$$U = e^{i\theta H} = \sum_h e^{i\theta h} P_h \tag{58}$$

e

$$U^\dagger = \sum_h (e^{i\theta h})^* P_h^\dagger = \sum_h e^{-i\theta h} P_h. \tag{59}$$

Por conseguinte,