05_composite

September 23, 2019

0.1 Notas de aula: Álgebra Linear, Autor: Jonas Maziero, Departamento de Física, UFSM

```
In [4]: %run init.ipynb
```

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 $k = 1, \cdots, \dim\mathcal{H}_b$.

1.0.1 Produto tensorial

O produto tensorial de duas matrizes $A \in \mathbb{C}^{m\text{x}n}$ e $B \in \mathbb{C}^{p\text{x}q}$ é uma matriz $mp\text{x}nq$ definida como:

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & \cdots & A_{1,d_a} \\ A_{2,1} & A_{2,2} & \cdots & A_{2,d_a} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ A_{d_a,1} & A_{d_a,2} & \cdots & A_{d_a,d_a} \end{bmatrix} \otimes B := \begin{bmatrix} A_{1,1}B & A_{1,2}B & \cdots & A_{1,d_a}B \\ A_{2,1}B & A_{2,2}B & \cdots & A_{2,d_a}B \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ A_{d_a,1}B & A_{d_a,2}B & \cdots & A_{d_a,d_a}B \end{bmatrix}. \tag{3}$$

Exemplo: Consideremos

$$A\otimes B = \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} \\ A_{2,1} & A_{2,2} \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} B_{1,1} & B_{1,2} \\ B_{2,1} & B_{2,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{1,1}\begin{bmatrix} B_{1,1} & B_{1,2} \\ B_{2,1} & B_{2,2} \end{bmatrix} & A_{1,2}\begin{bmatrix} B_{1,1} & B_{1,2} \\ B_{2,1} & B_{2,2} \end{bmatrix} \\ A_{2,1}\begin{bmatrix} B_{1,1} & B_{1,2} \\ B_{2,1} & B_{2,2} \end{bmatrix} & A_{2,2}\begin{bmatrix} B_{1,1} & B_{1,2} \\ B_{2,1} & B_{2,2} \end{bmatrix} \end{bmatrix} \tag{4}$$

$$= \begin{bmatrix} A_{1,1}B_{1,1} & A_{1,1}B_{1,2} & A_{1,2}B_{1,1} & A_{1,2}B_{1,2} \\ A_{1,1}B_{2,1} & A_{1,1}B_{2,2} & A_{1,2}B_{2,1} & A_{1,2}B_{2,2} \\ A_{2,1}B_{1,1} & A_{2,1}B_{1,2} & A_{2,2}B_{1,1} & A_{2,2}B_{1,2} \\ A_{2,1}B_{2,1} & A_{2,1}B_{2,2} & A_{2,2}B_{2,1} & A_{2,2}B_{2,2} \end{bmatrix}. \tag{5}$$

Exercício: Calcule o produto tensorial $\sigma_x \otimes \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$.

In [11]:
```
A11,A12,A21,A22,B11,B12,B21,B22 = symbols("A_11 A_12 A_21 A_22 B_11 B_12 B_21 B_22")
A = Matrix([[A11,A12],[A21,A22]])
B = Matrix([[B11,B12],[B21,B22]])
tp(A,B)
```

Out[11]:

$$\begin{bmatrix} A_{11}B_{11} & A_{11}B_{12} & A_{12}B_{11} & A_{12}B_{12} \\ A_{11}B_{21} & A_{11}B_{22} & A_{12}B_{21} & A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11} & A_{21}B_{12} & A_{22}B_{11} & A_{22}B_{12} \\ A_{21}B_{21} & A_{21}B_{22} & A_{22}B_{21} & A_{22}B_{22} \end{bmatrix}$$

1.0.2 Propriedade importante de 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

$$(A\otimes B)(C\otimes D) = \begin{bmatrix} A_{1,1}B & A_{1,2}B & \cdots \\ A_{2,1}B & A_{2,2}B & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}\begin{bmatrix} C_{1,1}D & C_{1,2}D & \cdots \\ C_{2,1}D & C_{2,2}D & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \tag{6}$$

$$= \begin{bmatrix} (A_{1,1}BC_{1,1}D + A_{1,2}BC_{2,1}D + \cdots) & (A_{1,1}BC_{1,2}D + A_{1,2}BC_{2,2}D + \cdots) & \cdots \\ (A_{2,1}BC_{1,1}D + A_{2,2}BC_{2,1}D + \cdots) & (A_{2,1}BC_{1,2}D + A_{2,2}BC_{2,2}D + \cdots) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \tag{7}$$

$$= \begin{bmatrix} (A_{1,1}C_{1,1} + A_{1,2}C_{2,1} + \cdots)BD & (A_{1,1}C_{1,2} + A_{1,2}C_{2,2} + \cdots)BD & \cdots \\ (A_{2,1}C_{1,1} + A_{2,2}C_{2,1} + \cdots)BD & (A_{2,1}C_{1,2} + A_{2,2}C_{2,2} + \cdots)BD & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \tag{8}$$

$$= \begin{bmatrix} (A_{1,1}C_{1,1} + A_{1,2}C_{2,1} + \cdots) & (A_{1,1}C_{1,2} + A_{1,2}C_{2,2} + \cdots) & \cdots \\ (A_{2,1}C_{1,1} + A_{2,2}C_{2,1} + \cdots) & (A_{2,1}C_{1,2} + A_{2,2}C_{2,2} + \cdots) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \otimes BD \tag{9}$$

$$= AC\otimes BD. \tag{10}$$

1.0.3 Construíndo bases compostas a partir de bases lindividuais

Vemos que o produto interno de dois elemento da "base composta" $|c_{lm}\rangle = |a_l\rangle \otimes |b_m\rangle$ é dado por:

$$\langle c_{jk}|c_{lm}\rangle = (\langle a_j| \otimes \langle b_k|)(|a_l\rangle \otimes |b_m\rangle) = \langle a_j|a_l\rangle \otimes \langle b_k|b_m\rangle = \delta_{j,l} \otimes \delta_{k,m} = \delta_{j,l}\delta_{k,m}. \tag{11}$$

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

$$d_{ab} \equiv \dim \mathcal{H}_{ab} = d_a d_b. \tag{12}$$

1.0.4 Exemplo

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

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

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

$$|c_{11}\rangle = |a_1\rangle \otimes |a_1\rangle = \begin{bmatrix} 1|a_1\rangle \\ 0|a_1\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{14}$$

$$|c_{12}\rangle = |a_1\rangle \otimes |a_2\rangle = \begin{bmatrix} 1|a_2\rangle \\ 0|a_2\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{15}$$

$$|c_{21}\rangle = |a_2\rangle \otimes |a_1\rangle = \begin{bmatrix} 0|a_1\rangle \\ 1|a_1\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{16}$$

$$|c_{22}\rangle = |a_2\rangle \otimes |a_2\rangle = \begin{bmatrix} 0|a_2\rangle \\ 1|a_2\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{17}$$

$$\tag{18}$$

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

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, A_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, A_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, A_4 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{19}$$

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

Exercício: Verifique que $|a\rangle \otimes \langle b| = |a\rangle\langle b|$ para quaisquer dois vetores $|a\rangle, |b\rangle \in \mathbb{C}^n$. Dica: Faça os dois produtos e verifique a igualdade.

Exercício: Verifique que $(A \otimes B)^\dagger = A^\dagger \otimes B^\dagger$. Dica: Use a definição do adjunto e expanda os vetores usados no produto interno em uma base que é o produto tensorial de bases locais.

2 Operadores positivos

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

$$\langle \psi | A | \psi \rangle \geq 0, \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}. \tag{20}$$

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

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | \sum_a a P_a | \psi \rangle = \sum_a a \langle \psi | P_a | \psi \rangle = \sum_a a \langle \psi | \langle a | \psi \rangle | a \rangle \tag{21}$$

$$= \sum_a a |\langle a | \psi \rangle|^2 \geq 0. \tag{22}$$

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

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = (|\psi\rangle, |A|\psi\rangle) = (|\psi\rangle, B^\dagger \circ B|\psi\rangle) = (B|\psi\rangle, B|\psi\rangle) \tag{23}$$

$$\equiv (|\phi\rangle, |\phi\rangle) \geq 0. \tag{24}$$

   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:

$$\langle Z \rangle := \sum_j p_j \langle \psi_j | Z | \psi_j \rangle \tag{25}$$

   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

$$\langle (X - Y) \rangle = \sum_j p_j \langle \psi_j | (X - Y) | \psi_j \rangle = \sum_j p_j (\geq 0) \geq 0 \tag{26}$$

$$= \sum_j p_j \langle \psi_j | X | \psi_j \rangle - \sum_j p_j \langle \psi_j | Y | \psi_j \rangle \tag{27}$$

$$= \langle X \rangle - \langle Y \rangle. \tag{28}$$

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

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:

$$A = \mathbb{I}_{\mathbb{C}^n} A \mathbb{I}_{\mathbb{C}^n} = \sum_{j=1}^{n} |\beta_j\rangle\langle\beta_j| A \sum_{k=1}^{n} |\beta_k\rangle\langle\beta_k| \tag{29}$$

$$= \sum_{j,k=1}^{n} \langle\beta_j|A|\beta_k\rangle |\beta_j\rangle\langle\beta_k|. \tag{30}$$

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**):

$$C = (\mathbb{I}_{\mathbb{C}^n} \otimes \mathbb{I}_{\mathbb{C}^m}) C (\mathbb{I}_{\mathbb{C}^n} \otimes \mathbb{I}_{\mathbb{C}^m}) \tag{31}$$

$$= \sum_{j,p=1}^{n} \sum_{k,q=1}^{m} ((\langle\alpha_j| \otimes \langle\beta_k|) C (|\alpha_p\rangle \otimes |\beta_q\rangle)) |\alpha_j\rangle\langle\alpha_p| \otimes |\beta_k\rangle\langle\beta_q|. \tag{32}$$

4 Traço parcial

Vimos que a função traço de uma operador linear $B : \mathcal{H}_b \to \mathcal{H}_b$ podia ser escrita como $Tr(B) = \sum_{j=1}^{d_b} \langle\beta_j|B|\beta_j\rangle$ com $\{|\beta_j\rangle\}_{j=1}^{d_b}$ sendo uma base qualquer de $\mathcal{H}_b$. Consideremos um operador linear atuando no espaço composto: $C : \mathcal{H}_a \otimes \mathcal{H}_b \to \mathcal{H}_a \otimes \mathcal{H}_b$. A função traço parcial Tr_b é uma função que leva operador lineares definidos em $\mathcal{H}_a \otimes \mathcal{H}_b$ em operadores lineares definidos em $\mathcal{H}_a$ e é definida por [arXiv:1601.07458]:

$$Tr_b(C) := \sum_{l=1}^{d_b} (\mathbb{I}_a \otimes \langle\beta_l|) C (\mathbb{I}_a \otimes |\beta_l\rangle) \tag{33}$$

Se aplicamos essa definição no operador C,

$$\mathrm{Tr}_{\mathbb{C}^m}(C) = \sum_{l=1}^{m} \mathbb{I}_{\mathbb{C}^n} \otimes \langle\beta_l| \left(\sum_{j,p=1}^{n} \sum_{k,q=1}^{m} (\langle\alpha_j| \otimes \langle\beta_k|) C (|\alpha_p\rangle \otimes |\beta_q\rangle) \, |\alpha_j\rangle\langle\alpha_p| \otimes |\beta_k\rangle\langle\beta_q| \right) \mathbb{I}_{\mathbb{C}^n} \otimes |\beta_l\rangle \tag{34}$$

$$= \sum_{l=1}^{m} \sum_{j,p=1}^{n} \sum_{k,q=1}^{m} (\langle\alpha_j| \otimes \langle\beta_k|) C (|\alpha_p\rangle \otimes |\beta_q\rangle) \, (\mathbb{I}_{\mathbb{C}^n} \otimes \langle\beta_l|)(|\alpha_j\rangle \otimes |\beta_k\rangle)(\langle\alpha_p| \otimes \langle\beta_q|)(\mathbb{I}_{\mathbb{C}^n} \otimes |\beta_l\rangle) \tag{35}$$

$$= \sum_{l=1}^{m} \sum_{j,p=1}^{n} \sum_{k,q=1}^{m} (\langle\alpha_j| \otimes \langle\beta_k|) C (|\alpha_p\rangle \otimes |\beta_q\rangle) \, (\mathbb{I}_{\mathbb{C}^n}|\alpha_j\rangle \otimes \langle\beta_l|\beta_k\rangle)(\langle\alpha_p|\mathbb{I}_{\mathbb{C}^n} \otimes \langle\beta_q|\beta_l\rangle) \tag{36}$$

$$= \sum_{j,p=1}^{n} \left(\sum_{l=1}^{m} (\langle\alpha_j| \otimes \langle\beta_l|) C (|\alpha_p\rangle \otimes |\beta_l\rangle) \right) |\alpha_j\rangle\langle\alpha_p| \tag{37}$$

$$=: \sum_{j,p=1}^{n} A_{j,p} |\alpha_j\rangle\langle\alpha_p|. \tag{38}$$

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

4.0.1 Exemplo: Entropia das partes maior que a entropia do todo

Seja $|e_1\rangle, |e_2\rangle \in \mathbb{C}^2$ uma base ortonormal. Consideremos o projetor no vetor $|\Psi\rangle = 2^{-1/2}\left(|e_1\rangle \otimes |e_2\rangle - |e_2\rangle \otimes |e_1\rangle\right)$ (chamado de estado singleto):

$$
\begin{aligned}
P_\Psi &= |\Psi\rangle\langle\Psi| = |\Psi\rangle|\Psi\rangle^\dagger && (39)\\
&= 2^{-1}(|e_1\rangle \otimes |e_2\rangle - |e_2\rangle \otimes |e_1\rangle)(|e_1\rangle \otimes |e_2\rangle - |e_2\rangle \otimes |e_1\rangle)^\dagger && (40)\\
&= 2^{-1}(|e_1\rangle \otimes |e_2\rangle - |e_2\rangle \otimes |e_1\rangle)((|e_1\rangle \otimes |e_2\rangle)^\dagger - (|e_2\rangle \otimes |e_1\rangle)^\dagger) && (41)\\
&= 2^{-1}(|e_1\rangle \otimes |e_2\rangle - |e_2\rangle \otimes |e_1\rangle)((|e_1\rangle)^\dagger \otimes (|e_2\rangle)^\dagger - (|e_2\rangle)^\dagger \otimes (|e_1\rangle)^\dagger) && (42)\\
&= 2^{-1}(|e_1\rangle \otimes |e_2\rangle - |e_2\rangle \otimes |e_1\rangle)(\langle e_1| \otimes \langle e_2| - \langle e_2| \otimes \langle e_1|) && (43)\\
&= 2^{-1}(|e_1\rangle\langle e_1| \otimes |e_2\rangle\langle e_2| - |e_1\rangle\langle e_2| \otimes |e_2\rangle\langle e_1| - |e_2\rangle\langle e_1| \otimes |e_1\rangle\langle e_2| + |e_2\rangle\langle e_2| \otimes |e_1\rangle\langle e_1|). && (44)
\end{aligned}
$$

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

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Tr}_d(P_\Psi) &= \sum_{j=1}^{2}(\mathbb{I}_e \otimes \langle e_j|)P_\Psi(\mathbb{I}_e \otimes |e_j\rangle) && (45)\\
&= (\mathbb{I}_e \otimes \langle e_1|)P_\Psi(\mathbb{I}_e \otimes |e_1\rangle) + (\mathbb{I}_e \otimes \langle e_2|)P_\Psi(\mathbb{I}_e \otimes |e_2\rangle) && (46)\\
&\vdots && (47)\\
&= 2^{-1}(|e_2\rangle\langle e_2| + |e_1\rangle\langle e_1|) && (48)\\
&= 2^{-1}\mathbb{I}_{\mathbb{C}^2}. && (49)
\end{aligned}
$$

Como vimos ao discutir a entropia de von Neumann, teremos que $S_{vn}(P_\Psi) = 0$ enquanto que $S_{vn}(\mathrm{Tr}_d(P_\Psi)) = S_{vn}(2^{-1}\mathbb{I}_{\mathbb{C}^2}) = \log_2(2) = 1$.

Exercício: Calcule o traço parcial aplicado ao espaço da "esquerda" do projetor no vetor $|\Phi\rangle = (|e_1\rangle \otimes |e_1\rangle + |e_2\rangle \otimes |e_2\rangle)/sqrt2$ (um dos estados do tripleto).

5 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

$$\langle\alpha_j|A^T|\alpha_k\rangle = \langle\alpha_k|A|\alpha_j\rangle. \tag{50}$$

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

$$T(\sum_{j,k} c_{j,k}|\alpha_j\rangle\langle\alpha_k|) := \sum_{j,k} c_{j,k} T(|\alpha_j\rangle\langle\alpha_k|) := \sum_{j,k} c_{j,k}|\alpha_k\rangle\langle\alpha_j|. \tag{51}$$

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:

$$T(A) = T(\sum_{j,k}\langle\alpha_j|A|\alpha_k\rangle|\alpha_j\rangle\langle\alpha_k|) \tag{52}$$

$$= \sum_{j,k}\langle\alpha_j|A|\alpha_k\rangle T(|\alpha_j\rangle\langle\alpha_k|) \tag{53}$$

$$= \sum_{j,k}\langle\alpha_j|A|\alpha_k\rangle|\alpha_k\rangle\langle\alpha_j|. \tag{54}$$

Assim,

$$\langle\alpha_p|T(A)|\alpha_q\rangle = \sum_{j,k}\langle\alpha_j|A|\alpha_k\rangle\langle\alpha_p|\alpha_k\rangle\langle\alpha_j|\alpha_q\rangle \tag{55}$$

$$= \sum_{j,k}\langle\alpha_j|A|\alpha_k\rangle\delta_{p,k}\delta_{j,q} \tag{56}$$

$$= \langle\alpha_q|A|\alpha_p\rangle. \tag{57}$$

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,

$$T(A) \geq_{\mathcal{H}} \forall A \geq_{\mathcal{H}}. \tag{58}$$

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

$$T_e(C) := T \otimes id(C) \tag{59}$$

$$= \sum_{j,p=1}^{n}\sum_{k,q=1}^{m}(\langle\alpha_j|\otimes\langle\beta_k|)C(|\alpha_p\rangle\otimes|\beta_q\rangle)T(|\alpha_j\rangle\langle\alpha_p|)\otimes id(|\beta_k\rangle\langle\beta_q|) \tag{60}$$

$$:= \sum_{j,p=1}^{n}\sum_{k,q=1}^{m}(\langle\alpha_j|\otimes\langle\beta_k|)C(|\alpha_p\rangle\otimes|\beta_q\rangle)|\alpha_p\rangle\langle\alpha_j|)\otimes|\beta_k\rangle\langle\beta_q|. \tag{61}$$

E assim (**exercício**)

$$(\langle\alpha_r|\otimes\langle\beta_s|)T_e(C)(|\alpha_t\rangle\otimes|\beta_u\rangle) = (\langle\alpha_t|\otimes\langle\beta_s|)T_e(C)(|\alpha_r\rangle\otimes|\beta_u\rangle). \tag{62}$$

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

$$T_e(P_\Psi) = T(|e_1\rangle\langle e_1|)\otimes id(|e_2\rangle\langle e_2|) - T(|e_1\rangle\langle e_2|)\otimes id(|e_2\rangle\langle e_1|) - T(|e_2\rangle\langle e_1|)\otimes id(|e_1\rangle\langle e_2|) + T(|e_2\rangle\langle e_2|)\otimes id(|e_1\rangle\langle e \tag{63}$$

$$= |e_1\rangle\langle e_1|\otimes|e_2\rangle\langle e_2| - |e_2\rangle\langle e_1|\otimes|e_2\rangle\langle e_1| - |e_1\rangle\langle e_2|)\otimes|e_1\rangle\langle e_2| + |e_2\rangle\langle e_2|\otimes|e_1\rangle\langle e_1| \tag{64}$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{65}$$

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

$$((\langle e_1| \otimes \langle e_1|)T_e(P_\Psi)(|e_1\rangle \otimes |e_1\rangle) = ((\langle e_1| \otimes \langle e_1|)(|e_1\rangle\langle e_1| \otimes |e_2\rangle\langle e_2|)(|e_1\rangle \otimes |e_1\rangle) - ((\langle e_1| \otimes \langle e_1|)(|e_2\rangle\langle e_1| \otimes |e_2\rangle\langle e_1|)(|e_1 \tag{66}$$

$$- ((\langle e_1| \otimes \langle e_1|)(|e_1\rangle\langle e_2|) \otimes |e_1\rangle\langle e_2|)(|e_1\rangle \otimes |e_1\rangle) + ((\langle e_1| \otimes \langle e_1|)(|e_2\rangle\langle e_2| \otimes |e_1\rangle\langle e_1|) \tag{67}$$

$$= \langle e_1|e_1\rangle\langle e_1|e_1\rangle \otimes \langle e_1|e_2\rangle\langle e_2|e_1\rangle - \langle e_1|e_2\rangle\langle e_1|e_1\rangle \otimes \langle e_1|e_2\rangle\langle e_1||e_1\rangle \tag{68}$$

$$- \langle e_1|e_1\rangle\langle e_2|e_1\rangle \otimes \langle e_1|e_1\rangle\langle e_2|e_1\rangle + \langle e_1|e_2\rangle\langle e_2|e_1\rangle \otimes \langle e_1|e_1\rangle\langle e_1|e_1\rangle \tag{69}$$

$$= 0. \tag{70}$$

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]:

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

6 Inversa do produto

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

$$(AB)^{-1}(AB) = \mathbb{I} \Rightarrow (AB)^{-1}ABB^{-1} = \mathbb{I}B^{-1} \tag{71}$$
$$\Rightarrow (AB)^{-1}A\mathbb{I}A^{-1} = B^{-1}A^{-1} \Rightarrow (AB)^{-1}\mathbb{I} = B^{-1}A^{-1}. \tag{72}$$

Ou seja,

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}. \tag{73}$$

7 Teorema (decomposição polar)

Para uma matriz quadrada qualquer A, podemos escrever

$$A = UJ = KV, \tag{74}$$

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 $U = AJ^{-1}$.

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:

$$A|j\rangle =: |\psi_j\rangle. \tag{75}$$

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

$$(|\psi_j\rangle, |\psi_k\rangle) = (A|j\rangle, A|k\rangle) = (A^\dagger A|j\rangle, |k\rangle) \tag{76}$$
$$= (J^2|j\rangle, |k\rangle) = (\lambda_j^2|j\rangle, |k\rangle) = \lambda_j^2(|j\rangle, |k\rangle) \tag{77}$$
$$= \lambda_j^2\delta_{j,k}. \tag{78}$$

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

$$|e_j\rangle := \frac{|\psi_j\rangle}{||\psi_j||} = \frac{|\psi_j\rangle}{\sqrt{\langle\psi_j|\psi_j\rangle}} = \frac{|\psi_j\rangle}{\lambda_j}. \tag{79}$$

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

$$U := \sum_j |e_j\rangle\langle j|. \tag{80}$$

Exercício: Verificar que esse operador é unitário.

Agora, para a ação dos operadores, teremos

$$\lambda_j > 0: \tag{81}$$
$$UJ|j\rangle = \sum_k |e_k\rangle\langle k|\lambda_j|j\rangle = \lambda_j \sum_k |e_k\rangle\langle k|j\rangle = \lambda_j|e_j\rangle = |\psi_j\rangle. \tag{82}$$
$$\lambda_j = 0: \tag{83}$$
$$UJ|j\rangle = U\lambda_j|j\rangle = U0|j\rangle = |\oslash\rangle = |\psi_j\rangle, \tag{84}$$
$$\tag{85}$$

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

$$A^{-1}A = (UJ)^{-1}(UJ) = J^{-1}U^{-1}UJ = J^{-1}\mathbb{I}J \tag{86}$$
$$= J^{-1}J = \mathbb{I}. \tag{87}$$

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

$$U = AJ^{-1}. \tag{88}$$

Concluimos assim a prova do teorema.

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

$$A = UDW. \tag{89}$$

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

$$D := WJW^\dagger = \sum_j \lambda_j W|j\rangle\langle j|W^\dagger =: \sum_j \lambda_j|c_j\rangle\langle c_j|. \tag{90}$$

Assim $W^\dagger DW = W^\dagger WJW^\dagger W = J$ e

$$A = SJ = SW^\dagger DW =: UDW, \tag{91}$$

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.

9 Teorema (decomposição de Schmidt)

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

$$|\Psi\rangle = \sum_{j,k} c_{j,k} |\alpha_j\rangle \otimes |\beta_k\rangle, \tag{92}$$

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

$$|\Psi\rangle = \sum_{j} d_j |\tilde{\alpha}_j\rangle \otimes |\tilde{\beta}_j\rangle, \tag{93}$$

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

9.1 Prova

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

$$c_{j,k} = (UDV)_{j,k} = \sum_l (UD)_{j,l} V_{l,k} = \sum_{l,m} U_{j,m} D_{m,l} V_{l,k} \tag{94}$$

$$=: \sum_{l,m} U_{j,m} d_l \delta_{l,m} V_{l,k} = \sum_l U_{j,l} d_l V_{l,k}. \tag{95}$$

Assim

$$|\Psi\rangle = \sum_{j,k} \sum_l U_{j,l} d_l V_{l,k} |\alpha_j\rangle \otimes |\beta_k\rangle \tag{96}$$

$$= \sum_l d_l \sum_j U_{j,l} |\alpha_j\rangle \otimes \sum_k V_{l,k} |\beta_k\rangle \tag{97}$$

$$=: \sum_l d_l |\tilde{\alpha}_l\rangle \otimes |\tilde{\beta}_l\rangle. \tag{98}$$

Vamos verificar a ortonormalidade das bases que definimos. Teremos

$$\langle \tilde{\alpha}_j | \tilde{\alpha}_k \rangle = |\tilde{\alpha}_j\rangle^\dagger |\tilde{\alpha}_k\rangle \tag{99}$$

$$= \sum_p U^*_{p,j} |\alpha_p\rangle^\dagger \sum_q U_{q,k} |\alpha_q\rangle \tag{100}$$

$$= \sum_{p,q} U^*_{p,j} U_{q,k} \langle \alpha_p | \alpha_q \rangle \tag{101}$$

$$= \sum_{p,q} U^*_{p,j} U_{q,k} \delta_{p,q} \tag{102}$$

$$= \sum_p (U^\dagger)_{j,p} U_{p,k} \tag{103}$$

$$= (U^\dagger U)_{j,k} = \delta_{j,k}. \tag{104}$$

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

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**):

$$P_\Psi = \sum_{j,k} d_j d_k |\tilde{\alpha}_j\rangle\langle\tilde{\alpha}_k| \otimes |\tilde{\beta}_j\rangle\langle\tilde{\beta}_k|. \tag{105}$$

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

$$E := Tr_d(P_\Psi) = \sum_{j,k} d_j d_k |\tilde{\alpha}_j\rangle\langle\tilde{\alpha}_k| \otimes Tr(|\tilde{\beta}_j\rangle\langle\tilde{\beta}_k|) \tag{106}$$

$$= \sum_{j,k} d_j d_k |\tilde{\alpha}_j\rangle\langle\tilde{\alpha}_k| \otimes \langle\tilde{\beta}_k|\tilde{\beta}_j\rangle = \sum_{j,k} d_j d_k |\tilde{\alpha}_j\rangle\langle\tilde{\alpha}_k| \otimes \delta_{k,j} \tag{107}$$

$$= \sum_j d_j^2 |\tilde{\alpha}_j\rangle\langle\tilde{\alpha}_j|. \tag{108}$$

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).