

Sistemas quânticos compostos e emaranhamento, sistemas quânticos abertos e decoerência¹.

A. F. R. de Toledo Piza

Instituto de Física, Universidade de São Paulo
C.P. 66318, 05315-970 São Paulo, S.P., Brasil

12/08/2009

Conteúdo:

1. Sistemas compostos na M.Q. e emaranhamento.	2
2. Quantificação do emaranhamento em estados puros.	11
3. Realidade do emaranhamento.	20
4. Sistemas compostos em estado mistos e o ‘ambiente’ como terceiro subsistema	26
Primeira aula de exercícios.	33
5. Sistemas monitorados por um ‘ambiente’.	35
6. Efeitos do ambiente sem o ambiente: equações mestras.	40
7. ‘Morte súbita’ do emaranhamento devida a monitoramento externo	46
Segunda aula de exercícios.	50
Bibliografia	52

¹Notas de aula para curso oferecido durante a segunda Escola de Física Teórica, Departamento de Física Matemática do IFUSP, 20 a 30 de julho de 2009.

1. - Sistemas compostos na M.Q. e emaranhamento.

1.0 Prolegômenos.

Estas notas foram preparadas como base para ou em consequência de um curso breve e tanto quanto possível autônomo que, com requisitos mínimos, sirva como introdução às questões que envolvem emaranhamento quântico e processos de decoerência na M.Q. Tal curso foi ministrado durante a segunda Escola de Física Teórica, organizada pelo Departamento de Física Matemática da USP e realizada de 20 a 30 de julho de 2009. As questões tratadas assumiram considerável proeminência nas últimas décadas, quando a realidade adquirida por correlações tipo Einstein-Podolski-Rosen, após o desenvolvimento teórico devido a Bell e aos consequentes testes experimentais específicos, deu origem por um lado à área de pesquisa hoje conhecida como ‘informação quântica’ e por outro lado ao programa de conectar a ‘emergência do mundo clássico’ a processos de decoerência. Embora a literatura disponível nesses assuntos seja atualmente enorme, referências a ela serão relativamente pouco numerosas, embora possam servir de ponto de partida para uma busca mais extensa ou refinada.

A ministração do curso contou com a colaboração segura e eficiente de Eduardo Toshio Domingues Matsushita, que se encarregou das aulas de exercícios.

1.1 Pressupostos, notação, etc.: M.Q. de sistemas simples (partícula puntiforme, spin).

A) Cinemática.

• Estados quânticos (super-)representados² por vetores (notação: $|\text{nome}\rangle$) de um espaço vetorial complexo \mathcal{H} com produto escalar hermiteano, i.e.

$$\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*,$$

que desempenha portanto o papel de espaço de fase para o sistema quântico. Como vetores de \mathcal{H} , os estados quânticos podem ser representados em diferentes bases $\{|n\rangle\}$ (por simplicidade ortonormais, i.e. $\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$, $\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}$ (operador identidade)):

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle.$$

As componentes (em geral complexas) $\langle n|\psi\rangle$ são interpretadas como amplitudes de probabilidade, $|\langle n|\psi\rangle|^2$ sendo interpretado como a probabilidade de ter o estado $|n\rangle$ em $|\psi\rangle$ (ou vice-versa).

• Variáveis dinâmicas (posição, momento, energia, spin, etc.) representadas por operadores hermiteanos (auto-adjuntos) no espaço de estados \mathcal{H} . Notação: $\hat{\mathbf{q}} \equiv \hat{q}_j$, $j = 1, 2, 3$, $\hat{\mathbf{p}} \equiv \hat{p}_j$, $j = 1, 2, 3$, \hat{H} , $\hat{\mathbf{s}} \equiv \hat{s}_j$, $j = 1, 2, 3$ etc. Relações de comutação: $[\hat{q}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}$, $[\hat{s}_j, \hat{s}_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{s}_l$. Os possíveis valores das variáveis dinâmicas são os autovalores (reais) dos operadores que as representam; os autovetores correspondentes representam estados em que a variável dinâmica em questão tem um valor bem definido (cf. afirmação acima sobre amplitudes de probabilidade); o conjunto de todos os autovetores de uma variável dinâmica é uma base em que é possível representar vetores de estado:

$$\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle, \quad \hat{\mathbf{q}}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle, \quad \hat{H}|E\rangle = E|E\rangle, \quad \hat{s}_z|m_s\rangle = \hbar m_s|m_s\rangle, \text{ etc.}$$

²A super-representação se refere à norma, fixada como 1 consistentemente com a interpretação dada a seguir, e à arbitrariedade de uma fase global, irrelevante para essa mesma interpretação.

$$|\psi\rangle = \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \equiv \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \psi(\mathbf{r}), \quad \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r} | = \hat{1}, \quad \text{etc.}$$

A função $\psi(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$ é a ‘função de onda’ que representa o estado $|\psi\rangle$. Valor esperado $\langle \hat{A} \rangle_\psi$ de uma variável dinâmica qualquer \hat{A} em $|\psi\rangle$:

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi \equiv \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_n a_n |\langle a_n | \psi \rangle|^2 \equiv \sum_n a_n p(a_n), \quad \hat{A} | a_n \rangle = a_n | a_n \rangle, \quad \langle a_n | a_{n'} \rangle = \delta_{nn'}$$

sendo $p(a_n) \equiv |\langle a_n | \psi \rangle|^2$ a probabilidade do valor a_n de \hat{A} em $|\psi\rangle$.

- Duas variáveis dinâmicas são compatíveis (possuem um conjunto completo comum de autovetores) se os respectivos operadores comutam. Um conjunto completo de observáveis compatíveis é um conjunto de variáveis dinâmicas compatíveis tal que a especificação dos respectivos autovalores sempre determina univocamente um vetor de estado.

- Uma forma de representar um estado quântico que tem em conta automaticamente a condição de normalização e que é explicitamente independente da fase global arbitrária é usar em vez de $|\psi\rangle$ o ‘operador densidade’

$$\hat{\rho}_\psi \equiv \frac{|\psi\rangle \langle \psi|}{\langle \psi | \psi \rangle}.$$

Notar que $\hat{\rho}_\psi = \hat{\rho}_\psi^\dagger = \hat{\rho}_\psi^2$, i.e., $\hat{\rho}_\psi$ é um operador de projeção, e portanto seus possíveis autovalores são 1 e 0. (A propriedade $\hat{\rho}_\psi = \hat{\rho}_\psi^2$ é chamada idempotência). Valor esperado de \hat{A} em termos desse objeto:

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi \equiv \frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \sum_n \frac{\langle \psi | n \rangle \langle n | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \sum_n \frac{\langle n | \hat{A} | \psi \rangle \langle \psi | n \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \equiv \text{Tr}(\hat{A} \hat{\rho}_\psi).$$

O traço $\text{Tr}(\hat{A} \hat{\rho}_\psi)$ é independente da base $\{|n\rangle\}$ utilizada, e é fácil ver que $\text{Tr}(\hat{A} \hat{\rho}_\psi) = \text{Tr}(\hat{\rho}_\psi \hat{A})$. De forma mais geral, é fácil ver que o traço de um produto de operadores é invariante por uma permutação cíclica deles, e.g. $\text{Tr}(\hat{A} \hat{B} \hat{C}) = \text{Tr}(\hat{C} \hat{A} \hat{B}) = \text{Tr}(\hat{B} \hat{C} \hat{A})$. A condição de normalização corresponde a $\text{Tr}(\hat{\rho}_\psi) = 1$.

B) Dinâmica.

- A evolução temporal do vetor de estado é determinística e regida pela equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle; \quad \text{cond. inicial } |\psi(t=0)\rangle.$$

A equação correspondente, quando o estado é descrito através do operador densidade dependente do tempo $\hat{\rho}_\psi(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| / \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle$ é

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}_\psi(t) = [\hat{H}, \hat{\rho}_\psi(t)] \quad (\text{Eq. de Liouville – von Neumann}).$$

- Soluções formais (\hat{H} independente do tempo):

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi(t=0)\rangle, \\
e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \equiv \hat{U}(t) &= \sum_n |E_n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \langle E_n| = 1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}t + \frac{1}{2!}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \hat{H}^2 t^2 + \dots; \\
\hat{\rho}_\psi(t) &= \hat{U}(t)\hat{\rho}_\psi(t=0)\hat{U}^\dagger(t).
\end{aligned}$$

Notar que $\hat{U}^\dagger(t) = \hat{U}^{-1}(t)$, isto é, a evolução temporal é unitária.

Observação. O sumário acima utiliza um tratamento “à la Dirac”, inclusive introduzindo ‘auto-vetores’ (‘impróprios’, pois ‘de norma infinita’ com propriedades de ‘ortonormalidade’ tratadas em termos de funções delta) para os espectros contínuos dos operadores de posição e momento.

1.2 M.Q. de sistemas compostos.

A) Cinemática.

• ‘Sistemas compostos’ são os que podem ser vistos como constituídos de duas (ou mais!) partes (ou ‘subsistemas’), e.g. duas (ou mais) partículas puntiformes, uma partícula com spin, dois (ou mais) spins, duas (ou mais) partículas com spin, etc. Caracterização do espaço de fase quântico para um sistema constituído de duas partes, duas partículas puntiformes para fixar idéias (a extensão para outros casos será óbvia):

i) \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 : espaços de fase para cada uma das partículas (partes) tomada isoladamente, com bases $\{|m^{(1)}\rangle\}$, $m = 1, 2, \dots$ e $\{|n^{(2)}\rangle\}$, $n = 1, 2, \dots$ respectivamente, com seus respectivos produtos escalares hermiteanos, etc.

ii) O espaço de fase para o sistema composto pelas duas partículas é o produto tensorial desses dois espaços (notação $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$), que pode ser construído como sendo gerado por todos os pares distintos de vetores das bases de cada um dos dois espaços. Os vetores $|\psi\rangle$ de \mathcal{H} são portanto da forma

$$|\psi\rangle = \sum_{m,n} c_{mn} |m^{(1)}\rangle \otimes |n^{(2)}\rangle \equiv \sum_{m,n} c_{mn} |m^{(1)}n^{(2)}\rangle$$

com duas notações distintas para os pares de vetores que constituem a base para o espaço produto.

iii) Os produtos escalares de \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 levam a um produto escalar em \mathcal{H} através de

$$\langle m^{(1)}n^{(2)} | m'^{(1)}n'^{(2)} \rangle \equiv \langle m^{(1)} | m'^{(1)} \rangle \langle n^{(2)} | n'^{(2)} \rangle = \delta_{mm'} \delta_{nn'}.$$

No lado direito dessa relação os produtos escalares usados são os definidos para os espaços \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 respectivamente, e foi suposta a ortonormalidade das bases escolhidas nesses espaços. Desse modo, se $|\psi'\rangle = \sum_{m,n} c'_{mn} |m^{(1)}n^{(2)}\rangle$ é outro vetor de \mathcal{H} ,

$$\langle \psi | \psi' \rangle = \sum_{m,n} c_{mn}^* c'_{mn} = \langle \psi' | \psi \rangle^*;$$

a normalização de um vetor de \mathcal{H} corresponde portanto à condição $\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{m,n} |c_{mn}|^2 = 1$.

Observação crucial: Todos os pares de vetores $|\phi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle$, com $|\phi^{(i)}\rangle \in \mathcal{H}_i$, $i = 1, 2$ fazem parte de \mathcal{H} (é imediato achar os c_{mn} correspondentes a partir dos coeficientes de expansão dos $|\phi^{(i)}\rangle$ nas bases de seus respectivos espaços), mas o espaço \mathcal{H} contém *muitíssimos* outros vetores que *não podem* ser escritos como produtos dessa forma. De fato,

$$|\phi^{(1)}\rangle = \sum_m \gamma_m^{(1)} |m^{(1)}\rangle, \quad |\phi^{(2)}\rangle = \sum_n \gamma_n^{(2)} |n^{(2)}\rangle \iff |\phi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle = \sum_{mn} \gamma_m^{(1)} \gamma_n^{(2)} |m^{(1)} n^{(2)}\rangle$$

e um vetor de \mathcal{H} poderá ser escrito como um produto de um vetor de \mathcal{H}_1 e outro de \mathcal{H}_2 sempre que seus coeficientes de expansão c_{mn} forem da forma $\gamma_m^{(1)} \gamma_n^{(2)}$. A razão básica para que isso não seja possível em geral é que, além de conter todos os vetores da forma $|\phi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle$, o espaço produto \mathcal{H} contém também todas as combinações lineares de qualquer número de vetores dessa forma, e essas combinações lineares não podem em geral ser escritas de forma fatorada. Exemplos simples:

1) $(|1^{(1)}2^{(2)}\rangle + |2^{(1)}1^{(2)}\rangle) / \sqrt{2}$ não é um estado produto. Neste caso $c_{12} = c_{21} = 1/\sqrt{2}$, $c_{11} = c_{22} = 0$ e os c_{mn} não podem ser escritos como $\gamma_m^{(1)} \gamma_n^{(2)}$.

2) $(|1^{(1)}2^{(2)}\rangle + |1^{(1)}3^{(2)}\rangle) / \sqrt{2}$ é, porém, um estado produto. Neste caso $c_{12} = c_{13} = 1/\sqrt{2}$, $\gamma_m^{(1)} = \delta_{1m}$, $\gamma_n^{(2)} = (\delta_{2n} + \delta_{3n})/\sqrt{2}$ e $c_{mn} = \gamma_m^{(1)} \gamma_n^{(2)}$. Portanto

$$\left(|1^{(1)}2^{(2)}\rangle + |1^{(1)}3^{(2)}\rangle \right) / \sqrt{2} = |1^{(1)}\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|2^{(2)}\rangle + |3^{(2)}\rangle \right).$$

Os estados do sistema composto representados por vetores de \mathcal{H} que *não* podem ser escritos de forma fatorada foram chamados por Schrödinger (em 1936!) *estados emaranhados*, e essa denominação é usada até hoje.

• Variáveis dinâmicas para o sistema composto: todas as variáveis dinâmicas \hat{A}_1 em \mathcal{H}_1 e \hat{B}_2 em \mathcal{H}_2 podem ser estendidas a variáveis dinâmicas em \mathcal{H} como

$$\hat{A}_1 \rightarrow \hat{A} = \hat{A}_1 \otimes \hat{1}_2 \quad \text{e} \quad \hat{B}_2 \rightarrow \hat{B} = \hat{1}_1 \otimes \hat{B}_2,$$

o que significa, explicitamente,

$$\begin{aligned} \hat{A}|\psi\rangle &= \hat{A} \sum_{mn} c_{mn} |m^{(1)}\rangle \otimes |n^{(2)}\rangle = \sum_{mn} c_{mn} \left(\hat{A}_1 |m^{(1)}\rangle \right) \otimes \left(\hat{1}_2 |n^{(2)}\rangle \right) = \sum_{mn} c_{mn} \left(\hat{A}_1 |m^{(1)}\rangle \right) \otimes |n^{(2)}\rangle, \\ \hat{B}|\psi\rangle &= \hat{B} \sum_{mn} c_{mn} |m^{(1)}\rangle \otimes |n^{(2)}\rangle = \sum_{mn} c_{mn} \left(\hat{1}_1 |m^{(1)}\rangle \right) \otimes \left(\hat{B}_2 |n^{(2)}\rangle \right) = \sum_{mn} c_{mn} |m^{(1)}\rangle \otimes \left(\hat{B}_2 |n^{(2)}\rangle \right). \end{aligned}$$

Note que i) essas definições não dependem da fatorabilidade do estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, e ii) $\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle$ para qualquer $|\psi\rangle$ de \mathcal{H} , i.e. dois operadores que agem não trivialmente apenas em partes diferentes do sistema composto comutam. Variáveis dinâmicas desse tipo porém evidentemente não exaurem a classe mais geral de operadores hermiteanos (auto-adjuntos) em \mathcal{H} , que em geral agem não trivialmente em ambas as partes dos vetores da base produto. Exemplos simples da classe mais geral são variáveis dinâmicas do tipo $\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2$, o que significa

$$\left(\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2 \right) |\psi\rangle = \left(\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2 \right) \sum_{mn} c_{mn} |m^{(1)}\rangle \otimes |n^{(2)}\rangle = \sum_{mn} c_{mn} \left(\hat{A}_1 |m^{(1)}\rangle \right) \otimes \left(\hat{B}_2 |n^{(2)}\rangle \right).$$

O vetor resultante da ação desse tipo de operador sobre um estado fatorável é ainda fatorável (embora em geral diferente do estado de partida), mas isso já não é em geral verdade para operadores do tipo $\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2 + \hat{A}'_1 \otimes \hat{B}'_2$:

$$\left(\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2 + \hat{A}'_1 \otimes \hat{B}'_2\right) |\psi\rangle = \sum_{mn} c_{mn} \left[\left(\hat{A}_1 |m^{(1)}\rangle\right) \otimes \left(\hat{B}_2 |n^{(2)}\rangle\right) + \left(\hat{A}'_1 |m^{(1)}\rangle\right) \otimes \left(\hat{B}'_2 |n^{(2)}\rangle\right) \right].$$

B) Dinâmica.

- A evolução temporal do vetor de estado de um sistema composto é dado pela equação de Schrödinger, sendo o hamiltoniano um operador hermiteano (auto-adjunto) \hat{H} que age sobre o espaço produto \mathcal{H} , e está portanto associada a uma transformação unitária $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ nesse espaço de fases.

- Quando $\hat{H} = \hat{H}_1 \otimes \hat{1}_2 + \hat{1}_1 \otimes \hat{H}_2$ (o que corresponde à ausência de interação entre as partes do sistema composto) essa evolução unitária pode ser fatorada como

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_1 \otimes \hat{1}_2 + \hat{1}_1 \otimes \hat{H}_2)t} = e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_1 \otimes \hat{1}_2)t} e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{1}_1 \otimes \hat{H}_2)t} = \left(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_1 t} \otimes \hat{1}_2\right) \left(\hat{1}_1 \otimes e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_2 t}\right) \\ &= \hat{U}_1(t) \otimes \hat{U}_2(t). \end{aligned}$$

Nesse caso, se $|\psi(t=0)\rangle$ é fatorizável, o vetor de estado permanecerá fatorizável para qualquer tempo t .

- Interações entre as partes do sistema composto correspondem a termos em \hat{H} que agem não trivialmente em ambas as partes do sistema composto. Por exemplo, um termo de interação pode ser um operador do tipo $g\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2$ (onde g é uma constante, possivelmente dimensional, caracterizando a intensidade da interação). Neste caso, o operador de evolução não pode mais ser fatorado como no caso anterior

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_1 \otimes \hat{1}_2 + \hat{1}_1 \otimes \hat{H}_2 + g\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2)t}$$

e, mesmo quando o estado inicial $|\psi(t=0)\rangle$ é fatorizável, ele em geral deixará de se-lo³ para $t > 0$. Em outras palavras, um estado inicial fatorizável se torna em geral emaranhado quando a dinâmica do sistema composto envolve interações entre suas partes.

1.3 Exemplos de emaranhamento.

A) Estados estacionários de um modelo simples para o átomo de hidrogênio.

O modelo mais simples para o átomo de hidrogênio é o de um sistema de duas partículas puntiformes carregadas. Hamiltoniano no espaço produto $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} \otimes \hat{1}_2 + \hat{1}_1 \otimes \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} - \frac{e^2}{|\hat{\mathbf{1}}_1 \otimes \hat{\mathbf{q}}_2 - \hat{\mathbf{q}}_1 \otimes \hat{\mathbf{1}}_2|}.$$

Os estados estacionários em que as duas partículas estão ligadas correspondem aos autovetores de \hat{H} tais que

³Mesmo no caso especial em que $\hat{H}_{\text{int}} = g(\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2)$ é uma constante do movimento, isto é, $[\hat{H}, \hat{H}_{\text{int}}] = 0$, a exponencial do termo de interação não tem forma fatorada do tipo $\hat{U}_{\text{int}}^{(1)} \otimes \hat{U}_{\text{int}}^{(2)}$ e a evolução temporal leva em ao emaranhamento das partes do sistema composto.

$$\hat{H}|\psi_E\rangle = E|\psi_E\rangle; \quad \psi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \psi_E \rangle; \quad \psi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rightarrow 0 \text{ para } |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1| \rightarrow \infty.$$

Devido ao termo de interação (último termo de \hat{H}), esses estados, vistos como estados do sistema composto pelas duas partículas, são emaranhados. O modo de obtê-los elementarmente consiste em reescrever \hat{H} em termos de operadores de centro de massa e do movimento relativo (no espaço produto):

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{Q}} &= \frac{m_1(\hat{\mathbf{q}}_1 \otimes \hat{\mathbf{I}}_2) + m_2(\hat{\mathbf{I}}_1 \otimes \hat{\mathbf{q}}_2)}{m_1 + m_2}, & \hat{\mathbf{q}} &= \hat{\mathbf{I}}_1 \otimes \hat{\mathbf{q}}_2 - \hat{\mathbf{q}}_1 \otimes \hat{\mathbf{I}}_2 \\ \hat{\mathbf{P}} &= \hat{\mathbf{p}}_1 \otimes \hat{\mathbf{I}}_2 + \hat{\mathbf{I}}_1 \otimes \hat{\mathbf{p}}_2, & \hat{\mathbf{p}} &= \frac{m_1(\hat{\mathbf{I}}_1 \otimes \hat{\mathbf{p}}_2) + m_2(\hat{\mathbf{p}}_1 \otimes \hat{\mathbf{I}}_2)}{m_1 + m_2} \end{aligned}$$

Em termos desses operadores o hamiltoniano é

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2(m_1 + m_2)} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\hat{\mathbf{q}}|}, \quad \mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2},$$

Essa forma sugere considerar uma fatorização alternativa do espaço produto \mathcal{H} , a saber

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \longrightarrow \mathcal{H}_{\text{CM}} \otimes \mathcal{H}_{\text{rel}},$$

usando a base produto $\{|\mathbf{R}\rangle \otimes |\mathbf{r}\rangle\} \equiv \{|\mathbf{R}\mathbf{r}\rangle\}$ em lugar de $\{|\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2\rangle\}$, o que equivale a ver o sistema como composto de duas novas partes, a parte referente ao centro de massa e a parte referente ao movimento relativo. O que torna isso possível é que tanto os dois operadores $\hat{\mathbf{q}}_1 \otimes \hat{\mathbf{I}}_2$ e $\hat{\mathbf{I}}_1 \otimes \hat{\mathbf{q}}_2$ como também⁴ $\hat{\mathbf{Q}}_{\text{CM}} \otimes \hat{\mathbf{I}}_{\text{rel}}$ e $\hat{\mathbf{I}}_{\text{CM}} \otimes \hat{\mathbf{q}}_{\text{rel}}$ são conjuntos completos de variáveis dinâmicas compatíveis em \mathcal{H} ; e o que torna isso na realidade trivial, neste caso, é o fato de que os operadores $\hat{\mathbf{q}}_1 \otimes \hat{\mathbf{I}}_2$ e $\hat{\mathbf{I}}_1 \otimes \hat{\mathbf{q}}_2$ comutam com $\hat{\mathbf{Q}}_{\text{CM}} \otimes \hat{\mathbf{I}}_{\text{rel}}$ e $\hat{\mathbf{I}}_{\text{CM}} \otimes \hat{\mathbf{q}}_{\text{rel}}$, e portanto têm autovetores comuns. Por esta razão, os vetores $\{|\mathbf{R}\mathbf{r}\rangle\}$ são na realidade os mesmos vetores que $\{|\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2\rangle\}$, apenas com uma rotulação diferente. E também $\psi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \psi_E \rangle$ se relaciona com $\psi_E(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \langle \mathbf{R}\mathbf{r} | \psi_E \rangle$ através de uma simples mudança de variáveis.

O hamiltoniano escrito explicitamente em termos dessa nova fatorização de \mathcal{H} é

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2(m_1 + m_2)} \otimes \hat{\mathbf{I}}_{\text{rel}} + \hat{\mathbf{I}}_{\text{CM}} \otimes \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\hat{\mathbf{q}}|} \right) \equiv \hat{H}_{\text{CM}} \otimes \hat{\mathbf{I}}_{\text{rel}} + \hat{\mathbf{I}}_{\text{CM}} \otimes \hat{H}_{\text{rel}},$$

e portanto descreve um sistema composto por duas partes não interagentes, em termos das quais é possível obter os estados estacionários $|\psi_E\rangle$ de forma fatorizada, $|\psi_E\rangle \rightarrow |\Phi_{E_{\text{CM}}}\rangle \otimes |\phi_{E_{\text{rel}}}\rangle$, com

$$\hat{H}_{\text{CM}}|\Phi_{E_{\text{CM}}}\rangle = E_{\text{CM}}|\Phi_{E_{\text{CM}}}\rangle, \quad \hat{H}_{\text{rel}}|\phi_{E_{\text{rel}}}\rangle = E_{\text{rel}}|\phi_{E_{\text{rel}}}\rangle, \quad E = E_{\text{CM}} + E_{\text{rel}}.$$

Os resultados são bem conhecidos:

$$\langle \mathbf{R} | \Phi_{\text{CM}} \rangle = \Phi_{\text{CM}}(\mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}, \quad E_{\text{CM}} = \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_1 + m_2)},$$

⁴Os operadores escritos como $\hat{\mathbf{Q}}_{\text{CM}}$ e $\hat{\mathbf{q}}_{\text{rel}}$ são respectivamente as restrições dos operadores $\hat{\mathbf{Q}}$ e $\hat{\mathbf{q}}$ aos espaços de fase da nova fatorização do espaço produto, $\mathcal{H}_{\text{CM}} \otimes \mathcal{H}_{\text{rel}}$.

independentemente da solução do problema de autovalores para \hat{H}_{rel} . O autovetor de menor energia (por exemplo) de \hat{H}_{rel} , é

$$\langle \mathbf{r} | \phi_{\text{rel}} \rangle = \phi_{\text{rel}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{|\mathbf{r}|}{a_0}}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu a_0}, \quad E_{\text{rel}} = -\frac{\mu e^2}{2\hbar^2},$$

Os autovetores correspondentes para o sistema composto, visto como sistema de duas partículas, são portanto

$$\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \psi_E \rangle = \psi_E(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2\pi a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{i\mathbf{K} \cdot \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}} e^{-\frac{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|}{a_0}}, \quad E = \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_1 + m_2)} - \frac{\mu e^2}{2\hbar^2}.$$

Esse estado não pode ser fatorizado devido à segunda das duas exponenciais, e o mesmo ocorre para os estados obtidos a partir de qualquer outra solução (inclusive para as que não representam estados ligados) de \hat{H}_{rel} . A energia total E pode assumir qualquer valor maior ou igual a E_{rel} .

Embora tenha sido possível escrever funções de onda que descrevem separadamente o estado do centro de massa e o estado relativo, não é possível, devido ao emaranhamento, escrever funções de onda que descrevam separadamente o estado do elétron e tampouco que descrevam o estado do próton, embora o sistema como um todo admita essa descrição.

Um fato, na realidade bastante óbvio, ilustrado por esse exemplo é o de que o emaranhamento entre duas partes de um sistema composto depende crucialmente da definição, ou escolha, das partes em que esse sistema é decomposto, que é refletida na fatorização adotada para o espaço de fases do sistema composto (no presente contexto, diferentes fatorizações são implementadas em termos de diferentes escolhas de bases-produto). Embora diferentes fatorizações (como, neste exemplo, partícula 1 e partícula 2 por um lado, e centro de massa e movimento relativo por outro) sejam ‘igualmente possíveis’ de um ponto de vista puramente teórico, elas podem ser muito distintas em termos, digamos, ‘experimentais’. No caso presente, medidas feitas sobre o elétron ou sobre o próton do átomo de hidrogênio (por exemplo, envolvendo as respectivas e distintas cargas elétricas) envolvem procedimentos distintos que observações feitas sobre o centro de massa ou sobre o movimento relativo.

B) Estados estacionários de um sistema de dois spins.

Bases em \mathcal{H}_i , $i = 1, 2$: $\{|m_i\rangle\}$, $m_i = \pm \frac{1}{2}$. A base correspondente para o produto tensorial $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ tem quatro vetores, $\{|m_1\rangle \otimes |m_2\rangle\} \equiv \{|m_1 m_2\rangle\}$, com as propriedades⁵

$$\left(\hat{s}_z^{(1)} \otimes \hat{1}_2 \right) |m_1 m_2\rangle = \hbar m_1 |m_1 m_2\rangle, \quad \left(\hat{1}_1 \otimes \hat{s}_z^{(2)} \right) |m_1 m_2\rangle = \hbar m_2 |m_1 m_2\rangle.$$

Um hamiltoniano no espaço produto:

$$\hat{H} = \frac{b_1}{\hbar} \left(\hat{s}_z^{(1)} \otimes \hat{1}_2 \right) + \frac{b_2}{\hbar} \left(\hat{1}_1 \otimes \hat{s}_z^{(2)} \right) + \frac{g}{\hbar^2} \left(\hat{\mathbf{s}}^{(1)} \cdot \hat{\mathbf{s}}^{(2)} \right). \quad (1)$$

Este hamiltoniano é relevante e.g. para um tratamento do efeito Zeeman da estrutura hiperfina do estado ligado 1s do átomo de hidrogênio; neste caso os termos contendo b_1 e b_2 descrevem a interação

⁵Spins $\frac{1}{2}$ têm espaços de fase bi-dimensionais e correspondem exatamente ao que se chama de q-bits (ou bits quânticos) no contexto da informação quântica, exceto apenas questões dimensionais que levam à omissão de fatores \hbar nos operadores relevantes. Outra diferença ocasional é o uso de 0 e 1 para rotular autovetores, em vez de $\pm \frac{1}{2}$, o que corresponde a usar os autovalores de $\frac{1}{2} + \frac{\hat{s}_z}{\hbar}$ como rótulos. Tudo o que se diz neste exemplo e no seguinte, portanto, se aplica integralmente a ‘sistemas de dois q-bits’.

dos momentos magnéticos associados aos dois spins com um campo magnético externo na direção z e o termo contendo g descreve a interação mútua dos dois momentos magnéticos. Como

$$\hat{\mathbf{s}}^{(1)} \cdot \hat{\mathbf{s}}^{(2)} = s_z^{(1)} \otimes s_z^{(2)} + \frac{1}{2} \left(s_+^{(1)} \otimes s_-^{(2)} + s_-^{(1)} \otimes s_+^{(2)} \right), \quad s_{\pm}^{(j)} \equiv s_x^{(j)} \pm i s_y^{(j)}, \quad j = 1, 2,$$

$$\hat{H}|\pm \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle = \left(\pm \frac{b_1 + b_2}{2} + \frac{g}{4} \right) |\pm \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle$$

e esses dois estados (não emaranhados) são estacionários. Por outro lado,

$$\hat{H}|\pm \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\rangle = \left(\pm \frac{b_1 - b_2}{2} + \frac{g}{4} \right) |\pm \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\rangle + \frac{g}{2} |\mp \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle$$

e neste caso os estados estacionários devem ser obtidos diagonalizando a matriz

$$\begin{pmatrix} \langle \frac{1}{2} - \frac{1}{2} | \hat{H} | \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \rangle & \langle \frac{1}{2} - \frac{1}{2} | \hat{H} | -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \rangle \\ \langle -\frac{1}{2} \frac{1}{2} | \hat{H} | \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \rangle & \langle -\frac{1}{2} \frac{1}{2} | \hat{H} | -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} b_1 - b_2 + g/2 & g \\ g & -b_1 + b_2 + g/2 \end{pmatrix}$$

o que leva a dois outros estados estacionários emaranhados (mutuamente ortogonais)

$$\begin{aligned} |E_+\rangle &= g/4 + \sqrt{g^2/4 + (b_1 - b_2)^2/4} \rangle = N_+ \left(|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle + \frac{\sqrt{g^2 + (b_1 - b_2)^2 - b_1 + b_2}}{g} |-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \right) \\ |E_-\rangle &= g/4 - \sqrt{g^2/4 + (b_1 - b_2)^2/4} \rangle = N_- \left(|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle - \frac{\sqrt{g^2 + (b_1 - b_2)^2 + b_1 - b_2}}{g} |-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \right) \end{aligned}$$

onde N_{\pm} são os apropriados coeficientes de normalização.

Neste caso é possível também construir uma nova fatorização do espaço de fases na qual todos os estados estacionários são fatorizáveis. Para isso, abreviando a notação para os estados estacionários emaranhados (na fatorização adotada, representada pela base produto $\{|m_1 m_2\rangle\}$) para

$$|E_+\rangle = \cos \alpha |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle + \sin \alpha |-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \quad \text{e} \quad |E_-\rangle = \sin \alpha |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle - \cos \alpha |-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle,$$

constrói-se a transformação unitária \hat{U}_α que transforma os vetores da base $\{|m_1 m_2\rangle\}$ nos autovetores de \hat{H} , que nessa mesma base se escreve como a matriz 4×4

$$\hat{U}_\alpha = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ 0 & \sin \alpha & -\cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Para construir essa matriz foi adotado o ordenamento $\{|\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle\}$ da base $\{|m_1 m_2\rangle\}$, e ela é tal que (por exemplo) $|E_+\rangle = \hat{U}_\alpha |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$, etc. Note que as colunas de \hat{U}_α são os coeficientes de expansão dos estados estacionários nessa base. Com essa transformação define-se os operadores

$$\hat{\Sigma}^{(1)} \equiv \hat{U}_\alpha \left(\hat{\mathbf{s}}^{(1)} \otimes \hat{\mathbf{1}}_2 \right) \hat{U}_\alpha^{-1}, \quad \hat{\Sigma}^{(2)} \equiv \hat{U}_\alpha \left(\hat{\mathbf{1}}_1 \otimes \hat{\mathbf{s}}^{(2)} \right) \hat{U}_\alpha^{-1}.$$

As componentes de $\hat{\Sigma}^{(1)}$ e as de $\hat{\Sigma}^{(2)}$ satisfazem as mesmas relações de comutação que as componentes de $\hat{\mathbf{s}}^{(1)} \otimes \hat{\mathbf{1}}_2$ e as de $\hat{\mathbf{1}}_1 \otimes \hat{\mathbf{s}}^{(2)}$ respectivamente, além de as componentes de $\hat{\Sigma}^{(1)}$ comutarem

com as de $\hat{\Sigma}^{(2)}$. Os operadores $\hat{\Sigma}_z^{(1)}$ e $\hat{\Sigma}_z^{(2)}$ podem portanto ser usados como um conjunto completo alternativo de observáveis compatíveis no espaço produto que permite implementar uma fatorização alternativa desse espaço

$$\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_{\Sigma^{(1)}} \otimes \mathcal{H}_{\Sigma^{(2)}}.$$

Diferentemente da situação encontrada no caso do átomo de hidrogênio, porém, esses operadores *não* comutam com $\hat{s}_z^{(1)} \otimes \hat{1}_2$ e $\hat{1}_1 \otimes \hat{s}_z^{(2)}$, o que tem como consequência o fato de que seus autovetores são distintos dos $\{|m_1 m_2\rangle\}$, embora com os mesmos autovalores. De fato, os dois conjuntos de autovetores se relacionam através da transformação unitária \hat{U}_α . A fatorização alternativa do espaço de fases do sistema composto pelos dois spins é implementada em termos dos autovetores comuns de $\hat{\Sigma}_z^{(1)}$ e $\hat{\Sigma}_z^{(2)}$, $\{|m_1 m_2\rangle_\Sigma\}$, interpretados como uma base produto alternativa. Em termos da nova fatorização do espaço de fases os autovetores de \hat{H} adquirem a forma fatorizada, e em particular

$$|E_+\rangle = |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle_\Sigma \quad \text{e} \quad |E_-\rangle = |-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle_\Sigma,$$

onde $|m_1 m_2\rangle_\Sigma$ são autovetores simultâneos de $\hat{\Sigma}_z^{(1)}$ e $\hat{\Sigma}_z^{(2)}$. Embora semelhante ao que ocorreu no caso das variáveis de centro de massa e relativas no caso do átomo de hidrogênio, é preciso notar diferenças importantes: 1) enquanto no caso do átomo de hidrogênio as duas fatorizações do espaço de fase do sistema composto foram definidas sem qualquer referência aos estados estacionários do hamiltoniano, aqui foi feito uso explícito desses estados na construção da transformação unitária \hat{U}_α , que depende, em particular, dos valores assumidos pelos parâmetros do hamiltoniano; e 2) devido à não comutatividade dos ‘novos spins’ $\hat{\Sigma}_z^{(1)}$ e $\hat{\Sigma}_z^{(2)}$ com $\hat{s}_z^{(1)} \otimes \hat{1}_2$ e $\hat{1}_1 \otimes \hat{s}_z^{(2)}$, esses objetos são na realidade bastante exóticos (por exemplo, em termos de sua observação) em confronto com os spins ‘naturais’ $\hat{s}^{(1)}$ e $\hat{s}^{(2)}$.

C) Emaranhamento dinâmico de dois spins.

A evolução temporal do estado inicial não emaranhado $|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$ sob ação do hamiltoniano \hat{H} do exemplo anterior é facilmente obtida de forma explícita usando sua expansão em termos dos autovetores de \hat{H} (estados estacionários):

$$|t=0\rangle \equiv |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle = \cos \alpha |E_+\rangle + \sin \alpha |E_-\rangle;$$

$$\begin{aligned} |t\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_- t} \left(\cos \alpha e^{-\frac{i}{\hbar} (E_+ - E_-) t} |E_+\rangle + \sin \alpha |E_-\rangle \right) = \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} E_- t} \left[\left(\cos^2 \alpha e^{-\frac{i}{\hbar} (E_+ - E_-) t} + \sin^2 \alpha \right) |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle + \sin \alpha \cos \alpha \left(e^{-\frac{i}{\hbar} (E_+ - E_-) t} - 1 \right) |-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \right]. \end{aligned}$$

Esse estado dependente de t é solução da equação de Schrödinger $\hat{H}|t\rangle = i\hbar d|t\rangle/dt$ com a condição inicial $|t=0\rangle$. Para um valor geral de α ele é claramente um estado emaranhado exceto para os valores de t tais que $(E_+ - E_-)t/\hbar = 2n\pi$, nos quais ele volta (a menos de uma fase global irrelevante) ao estado inicial. É fácil ver que esse emaranhamento pulsante depende crucialmente do termo de acoplamento dos dois spins, $g(\hat{s}^{(1)} \cdot \hat{s}^{(2)})$. De fato, para $g \rightarrow 0$, $\alpha \rightarrow \pi/2$ e o estado inicial se torna estacionário.

Por outro lado, para $b_1 = b_2$ (com $g \neq 0$) resulta $\alpha = \pi/4$, e o estado inicial se torna fatorizável também nos tempos tais que $(E_+ - E_-)t/\hbar = (2n+1)\pi$. Nesses tempos, sempre a menos de uma fase global, o estado inicial $|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$ se reduz a $|-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle$.

2. - Quantificação do emaranhamento em estados puros.

No último exemplo, embora o estado que descreve o sistema de dois spins seja já um estado emaranhado mesmo para tempos arbitrariamente curtos (o que significa, mais especificamente, para $(E_+ - E_-)t/\hbar \ll 1$), é de se supor, em vista da evolução unitária contínua do estado inicial não emaranhado com o tempo, que ele seja ainda em algum sentido ‘menos emaranhado’ que em tempos um pouco maiores. Neste exemplo particular, o estado pode ser escrito em qualquer tempo como combinação linear de dois estados fatorizáveis ortogonais. Uma possível medida de emaranhamento poderia ser pensada em termos da probabilidade relativa dos dois estados ortogonais fatorizados: quando um deles for muito mais provável que o outro (em termos das regras da M.Q.) o emaranhamento seria ‘menor’ que quando as duas probabilidades forem comparáveis, pois ele seria ainda ‘aproximadamente fatorizável’, à custa de ignorar a componente de probabilidade muito menor. O objetivo aqui será introduzir uma medida geral da ‘quantidade de emaranhamento’ em um estado de um sistema composto de duas partes (usualmente chamado ‘bipartido’, ou mesmo ‘bitartite’!). Como a fatorabilidade ou não fatorabilidade depende de uma particular escolha das partes em que o sistema é dividido, esta medida se refere sempre a uma bipartição determinada a priori, por exemplo através de critérios ‘físicos’, ou ‘experimentais’, e implementada em termos de uma base fatorizada no espaço de fase do sistema composto.

2.1 Matrizes densidade e subsistemas.

Quando o estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ de um sistema composto não é emaranhado, isto é, $|\psi\rangle = |\phi^{(1)}\rangle \otimes |\phi^{(2)}\rangle$, com $|\phi^{(i)}\rangle \in \mathcal{H}_i$, $i = 1, 2$, o estado de cada um dos dois subsistemas pode ser por sua vez descrito pelos vetores de estado $|\phi^{(i)}\rangle$ nos seus respectivos espaços de fase. Esse tipo de descrição torna-se no entanto impossível quando o estado do sistema composto é emaranhado. Uma descrição alternativa pode ser formulada em termos de operadores (ou matrizes) densidade:

1) Se $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ (emaranhado ou não)

$$|\psi\rangle \longrightarrow \hat{\rho}_\psi = \frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle}.$$

Usualmente o denominador é omitido com a suposição de que o estado $|\psi\rangle$ é normalizado.

2) O valor médio em $\hat{\rho}_\psi$ de uma variável dinâmica qualquer $\hat{A} = \hat{A}_1 \otimes \hat{I}_2$ do subsistema 1, $\langle\hat{A}\rangle_\psi = \text{Tr}(\hat{A}\hat{\rho}_\psi)$ pode ser explicitado em termos da base produto $\{|m^{(1)}n^{(2)}\rangle\}$:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\hat{A}\hat{\rho}_\psi) &= \sum_{m,n} \langle m^{(1)}n^{(2)} | \hat{A}\hat{\rho}_\psi | m^{(1)}n^{(2)} \rangle = \sum_{m,n} \sum_{m',n'} \langle m^{(1)}n^{(2)} | \hat{A} | m'^{(1)}n'^{(2)} \rangle \langle m'^{(1)}n'^{(2)} | \hat{\rho}_\psi | m^{(1)}n^{(2)} \rangle = \\ &= \sum_{m,n} \sum_{m',n'} \langle m^{(1)} | \hat{A}_1 | m'^{(1)} \rangle \delta_{nn'} \langle m'^{(1)}n'^{(2)} | \hat{\rho}_\psi | m^{(1)}n^{(2)} \rangle = \\ &= \sum_{m,m'} \langle m^{(1)} | \hat{A}_1 | m'^{(1)} \rangle \sum_n \langle m'^{(1)}n^{(2)} | \hat{\rho}_\psi | m^{(1)}n^{(2)} \rangle \equiv \sum_{m,m'} \langle m^{(1)} | \hat{A}_1 | m'^{(1)} \rangle \langle m'^{(1)} | \hat{\rho}_\psi^{(1)} | m^{(1)} \rangle = \\ &= \text{Tr}_1 \left(\hat{A}_1 \hat{\rho}_\psi^{(1)} \right). \end{aligned}$$

onde Tr_1 indica o traço no espaço de fase \mathcal{H}_1 . O valor médio de qualquer variável dinâmica do primeiro subsistema pode portanto ser obtido a partir da matriz

$$\langle m'^{(1)} | \hat{\rho}_\psi^{(1)} | m^{(1)} \rangle \equiv \sum_n \langle m'^{(1)} n^{(2)} | \hat{\rho}_\psi | m^{(1)} n^{(2)} \rangle$$

que é obtida da matriz densidade completa $\langle m'^{(1)} n^{(2)} | \hat{\rho}_\psi | m^{(1)} n^{(2)} \rangle$ através de um *traço parcial* tomado sobre os índices de \mathcal{H}_2 . Esse traço parcial é uma matriz que está associada a um operador densidade $\hat{\rho}_\psi^{(1)}$ no espaço de fase \mathcal{H}_1 . Ele desempenha portanto para o subsistema 1 o mesmo papel que o operador densidade $\hat{\rho}_\psi$ desempenha para o sistema completo, e nesse sentido descreve o estado desse subsistema. É claro que o mesmo cálculo pode ser feito para uma variável dinâmica $\hat{B} = \hat{1}_1 \otimes \hat{B}_2$ do segundo subsistema, com resultado análogo ao anterior

$$\text{Tr}(\hat{B}\hat{\rho}_\psi) = \text{Tr}_2(\hat{B}_2\hat{\rho}_\psi^{(2)}) \quad \text{com} \quad \langle n'^{(2)} | \hat{\rho}_\psi^{(2)} | n^{(2)} \rangle \equiv \sum_m \langle m^{(1)} n'^{(2)} | \hat{\rho}_\psi | m^{(1)} n^{(2)} \rangle.$$

e o operador densidade reduzido $\hat{\rho}_\psi^{(2)}$, obtido como um traço parcial tomado sobre os índices referentes ao primeiro subsistema, descreve no mesmo sentido o estado do segundo subsistema. Notação para as operações de traço parcial para a obtenção das densidades reduzidas explicitadas acima:

$$\hat{\rho}_\psi^{(1)} = \text{Tr}_2(\hat{\rho}_\psi), \quad \hat{\rho}_\psi^{(2)} = \text{Tr}_1(\hat{\rho}_\psi).$$

Essa notação se justifica por serem esses traços independentes das particulares bases de \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 (e portanto da particular base produto) utilizadas para uma representação matricial explícita.

3) As matrizes densidade reduzidas (ou, equivalentemente os operadores densidade reduzidos) têm uma série de propriedades em comum com os operadores densidade completos $\hat{\rho}_\psi$ e, em geral, uma diferença importante. As propriedades comuns são

- hermiticidade (portanto autovalores reais):

$$\langle n'^{(j)} | \hat{\rho}_\psi^{(j)} | n^{(j)} \rangle = \langle n^{(j)} | \hat{\rho}_\psi^{(j)} | n'^{(j)} \rangle^* \quad \text{ou} \quad \hat{\rho}_\psi^{(j)} = \hat{\rho}_\psi^{(j)\dagger}.$$

- traço 1:

$$\text{Tr}_1(\hat{\rho}_\psi^{(1)}) = \text{Tr}_2(\hat{\rho}_\psi^{(2)}) = 1.$$

Isso resulta do fato de que o resultado desses traços é simplesmente o traço completo do operador densidade $\hat{\rho}_\psi$. Por outro lado, a diferença importante é:

♣ As densidades reduzidas $\hat{\rho}_\psi^{(1)}$ e $\hat{\rho}_\psi^{(2)}$ em geral *não são* operadores idempotentes, i.e., em geral $\hat{\rho}_\psi^{(j)} \neq (\hat{\rho}_\psi^{(j)})^2$, $j = 1, 2$. Para mostrar isso é suficiente um exemplo simples. O operador densidade correspondente ao estado de dois spins obtido anteriormente

$$|E_+\rangle = \cos\alpha|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle + \text{sen}\alpha|-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle \longrightarrow \hat{\rho}_{E_+} = |E_+\rangle\langle E_+|$$

leva aos operadores densidade reduzidos

$$\hat{\rho}_{E_+}^{(1)} = \cos^2\alpha|\frac{1}{2}\rangle\langle\frac{1}{2}| + \text{sen}^2\alpha|-\frac{1}{2}\rangle\langle-\frac{1}{2}| \quad \text{e} \quad \hat{\rho}_{E_+}^{(2)} = \text{sen}^2\alpha|\frac{1}{2}\rangle\langle\frac{1}{2}| + \cos^2\alpha|-\frac{1}{2}\rangle\langle-\frac{1}{2}|$$

que são autoadjuntos e têm traço 1 mas que são não idempotentes para $\alpha \neq n\pi/2$.

No caso dos operadores densidade reduzidos, a propriedade de idempotência é substituída pela propriedade mais fraca da *não negatividade*: os seus autovalores podem ser positivos ou nulos, mas não negativos. Para provar a não negatividade basta notar que

$$\langle \phi_1 | \hat{\rho}_\psi^{(1)} | \phi_1 \rangle = \sum_n \langle \phi_1 n^{(2)} | \hat{\rho}_\psi | \phi_1 n^{(2)} \rangle = \sum_n |\langle \psi | \phi_1 n^{(2)} \rangle|^2 \geq 0,$$

para *qualquer* vetor $|\phi_1\rangle$ de \mathcal{H}_1 , e um resultado análogo para $\hat{\rho}_\psi^{(2)}$.

A idempotência garante que os autovalores possíveis são apenas 1 e 0, e dado que os operadores densidade são operadores de traço 1, garante para estes operadores que há apenas um autovalor diferente de zero que é então necessariamente 1. O autovetor correspondente a esse autovalor é na realidade o vetor de estado correspondente, i.e., $|\psi\rangle$ para $\hat{\rho}_\psi$. Os estados quânticos descritos por operadores densidade idempotentes (e que podem também ser descritos por vetores de estado) são chamados *estados puros*. Estados que não são estados puros, descritos por operadores densidade não idempotentes, são chamados *estados mistos*. Essas denominações se estendem aos próprios operadores densidade, que também podem portanto ser puros ou mistos.

2.2 Decomposição de Schmidt.

Um vetor de estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ é em geral escrito em termos de uma base produto dada $\{|m^{(1)}n^{(2)}\rangle\}$ em termos de uma soma dupla, envolvendo os índices de cada um dos dois espaços fatores respectivamente:

$$|\psi\rangle = \sum_{m,n} c_{mn} |m^{(1)}n^{(2)}\rangle \quad \text{com} \quad c_{mn} = \langle m^{(1)}n^{(2)} | \psi \rangle, \quad \sum_{m,n} |c_{mn}|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = 1.$$

Os coeficientes c_{mn} dependem evidentemente da base escolhida. A chamada decomposição de Schmidt de um vetor de estado $|\psi\rangle$ é na realidade uma expansão desse mesmo tipo, porém feita em termos de uma base produto $\{|\mu^{(1)}\nu^{(2)}\rangle\}$, especialmente escolhida para o vetor $|\psi\rangle$, em termos da qual $c_{\mu\nu} = \langle \mu^{(1)}\nu^{(2)} | \psi \rangle = \gamma_\mu \delta_{\mu,\nu}$, isto é, existe um emparelhamento de pares de vetores das bases especiais de \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 tal que cada um desses pares aparece uma única vez na expansão, que passa portanto a envolver uma soma simples, em vez de uma soma dupla como no caso geral:

$$|\psi\rangle = \sum_\mu \gamma_\mu |\mu^{(1)}\mu^{(2)}\rangle, \quad \sum_\mu |\gamma_\mu|^2 = 1; \quad |\mu^{(1)}\mu^{(2)}\rangle \equiv |\mu^{(1)}\rangle \otimes |\mu^{(2)}\rangle, \quad \langle \mu'^{(j)} | \mu^{(j)} \rangle = \delta_{\mu\mu'}, \quad j = 1, 2.$$

É claro que a possibilidade *geral* de reduzir a expansão dupla a uma expansão simples mediante uma escolha apropriada de bases ortonormais em \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 está longe de ser óbvia e exige demonstração. Mas, admitindo por um momento essa possibilidade, é útil antecipar algumas de suas consequências, pois elas sugerem inclusive um caminho para a demonstração.

Admitindo a existência da decomposição de Schmidt do vetor de estado ψ , os operadores densidade reduzidos obtidos de $\hat{\rho}_\psi$ podem ser escritos sob a forma

$$\hat{\rho}_\psi^{(1)} = \sum_\mu |\gamma_\mu|^2 |\mu^{(1)}\rangle \langle \mu^{(1)}| \quad \text{e} \quad \hat{\rho}_\psi^{(2)} = \sum_\mu |\gamma_\mu|^2 |\mu^{(2)}\rangle \langle \mu^{(2)}|.$$

Da suposta ortonormalidade (nos respectivos \mathcal{H}_j) dos vetores $|\mu^{(j)}\rangle$, resulta então que a) esses vetores são autovetores dos operadores densidade reduzidos $\rho_\psi^{(j)}$ respectivamente; b) os autovalores correspondentes são $|\gamma_\mu|^2$; e ainda c) os dois operadores densidade reduzidos têm os mesmos autovalores não

ulos. Essas propriedades previstas sugerem um procedimento para construir explicitamente a base produto envolvida na decomposição de Schmidt a partir do operador densidade $\hat{\rho}\psi$ e dessa forma demonstrar sua existência. O primeiro passo é obter os autovetores e autovalores de um dos dois operadores densidade reduzidos. Caso um ou os dois espaços de fase de cada um dos subsistemas \mathcal{H}_j , $j, 1, 2$, tenham dimensão finita, é conveniente tomar o operador densidade reduzido que atua no espaço de menor dimensão. Seja esse espaço \mathcal{H}_1 . Devido às propriedades gerais dos operadores densidade reduzidos (operadores auto-adjuntos não negativos de traço 1), o espectro é puramente discreto, com autovalores reais, aos quais é sempre possível associar um conjunto ortonormal de autovetores:

$$\hat{\rho}_\psi^{(1)}|\mu^{(1)}\rangle = p_\mu|\mu^{(1)}\rangle, \quad \langle\mu'^{(1)}|\mu^{(1)}\rangle = \delta_{\mu\mu'}, \quad \sum_\mu p_\mu = \text{Tr}_1(\hat{\rho}_\psi^{(1)}) = 1.$$

Isso já fornece o que deve ser uma das bases envolvidas na base produto de Schmidt. A base apropriada em \mathcal{H}_2 (cuja dimensão, pelo que foi suposto, é igual ou maior que a de \mathcal{H}_1) pode ser obtida por meio de uma aplicação \mathcal{S}_ψ , que leva vetores de \mathcal{H}_1 em vetores de \mathcal{H}_2 , definida por meio do estado $|\psi\rangle$ do sistema composto. Essa aplicação pode ser escrita em termos de uma base qualquer $\{|n^{(2)}\rangle\}$ de \mathcal{H}_2 como

$$|\mu^{(1)}\rangle \in \mathcal{H}_1; \quad \mathcal{S}_\psi|\mu^{(1)}\rangle = \sum_n |n^{(2)}\rangle \langle\mu^{(1)}n^{(2)}|\psi\rangle \equiv |\tilde{\mu}^{(2)}\rangle \in \mathcal{H}_2.$$

A aplicação \mathcal{S}_ψ pode ser vista na realidade como um ‘produto escalar parcial’ de vetores de \mathcal{H}_1 com o vetor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Não é difícil agora verificar que os vetores $|\tilde{\mu}^{(2)}\rangle \in \mathcal{H}_2$, obtidos dessa forma a partir dos autovetores $|\mu^{(1)}\rangle \in \mathcal{H}_1$ de $\hat{\rho}_\psi^{(1)}$, são autovetores de $\hat{\rho}_\psi^{(2)}$ com autovalores iguais aos autovalores dos $|\mu^{(1)}\rangle$ correspondentes, isto é $\hat{\rho}_\psi^{(2)}|\tilde{\mu}^{(2)}\rangle = p_\mu|\tilde{\mu}^{(2)}\rangle$. De fato, escrevendo o operador reduzido $\hat{\rho}_\psi^{(2)}$ em termos da base produto constituída pelos vetores $|\mu^{(1)}\rangle \otimes |n^{(2)}\rangle$, onde os vetores $|\mu^{(1)}\rangle$ são os autovetores normalizados e ortogonais de $\hat{\rho}_\psi^{(1)}$,

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_\psi^{(2)}|\tilde{\mu}^{(2)}\rangle &= \sum_{n,n'} |n^{(2)}\rangle \left(\sum_{\mu'} \langle\mu'^{(1)}n^{(2)}|\psi\rangle \langle\psi|\mu'^{(1)}n^{(2)}\rangle \right) \langle\mu^{(1)}n^{(2)}|\psi\rangle = \\ &= \sum_{\mu',n'} |n^{(2)}\rangle \langle\mu'^{(1)}n^{(2)}|\psi\rangle \left(\sum_n \langle\mu^{(1)}n^{(2)}|\psi\rangle \langle\psi|\mu'^{(1)}n^{(2)}\rangle \right) = \\ &= \sum_{\mu',n'} |n^{(2)}\rangle \langle\mu'^{(1)}n^{(2)}|\psi\rangle p_\mu \delta_{\mu,\mu'} = p_\mu |\tilde{\mu}^{(2)}\rangle. \end{aligned}$$

Desse modo, todos os autovetores de $\hat{\rho}_\psi^{(1)}$ são levados por \mathcal{S}_ψ a autovetores de $\hat{\rho}_\psi^{(2)}$ com os mesmos autovalores. Mas a soma dos autovalores é 1 pela condição sobre o traço de $\hat{\rho}_\psi^{(1)}$, e portanto se a dimensão do espaço \mathcal{H}_2 é maior que a do espaço \mathcal{H}_1 , tendo em conta a propriedade de não negatividade, os autovetores restantes de $\hat{\rho}_\psi^{(2)}$ (que portanto não podem ser obtidos a partir de autovetores de $\hat{\rho}_\psi^{(1)}$) têm autovalor zero.

Os autovetores $|\tilde{\mu}^{(2)}\rangle$ obtidos através de \mathcal{S}_ψ de autovetores ortonormais $|\mu^{(1)}\rangle$ são ortogonais mas não normalizados. De fato

$$\langle\tilde{\mu}'^{(2)}|\tilde{\mu}^{(2)}\rangle = \sum_n \langle\psi|\mu'^{(1)}n^{(2)}\rangle \langle\mu^{(1)}n^{(2)}|\psi\rangle = \langle\mu^{(1)}|\hat{\rho}_\psi^{(1)}|\mu'^{(1)}\rangle = p_\mu \delta_{\mu,\mu'}.$$

donde segue que $\langle \mu'^{(2)} | \mu^{(2)} \rangle = \delta_{\mu\mu'}$ com $|\mu^{(2)}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{p_\mu}} |\tilde{\mu}^{(2)}\rangle$. Por outro lado, o vetor $|\psi\rangle$ pode ser expandido como

$$|\psi\rangle = \sum_{\mu,n} |\mu^{(1)} n^{(2)}\rangle \langle \mu^{(1)} n^{(2)} | \psi \rangle = \sum_{\mu} |\mu^{(1)}\rangle \otimes |\tilde{\mu}^{(2)}\rangle = \sum_{\mu} \sqrt{p_\mu} \left(|\mu^{(1)}\rangle \otimes |\mu^{(2)}\rangle \right)$$

que é a decomposição de Schmidt desse vetor, com $\gamma_\mu = \sqrt{p_\mu}$. A realidade desses coeficientes de expansão se deve ao fato de que as fases necessárias foram incorporadas aos vetores $|\mu^{(1)}\rangle$ e $|\mu^{(2)}\rangle$ pelo processo de sua construção envolvendo \mathcal{S}_ψ . Note que autovetores de $\hat{\rho}_\psi^{(2)}$ com autovalor nulo não participam na decomposição de Schmidt.

O valor médio de um observável \hat{A}_1 do subsistema 1 em termos da base de Schmidt é

$$\langle \hat{A}_1 \rangle = \text{Tr} \left(\hat{A}_1 \hat{\rho}_1 \right) = \sum_{\mu} |\gamma_\mu|^2 \langle \mu^{(1)} | \hat{A}_1 | \mu^{(1)} \rangle,$$

que é uma soma (incoerente) de valores médios nos autovetores de $\hat{\rho}_1$ ponderada com os respectivos autovalores (cuja soma é 1). Um resultado correspondente vale para o subsistema 2. O caráter incoerente da soma significa que, de um ponto de vista restrito a um dos dois subsistemas, não haverá efeitos de interferência quântica envolvendo autovetores distintos da densidade reduzida correspondente. Os pesos $p_\mu = |\gamma_\mu|^2$ são valores médios dos projetores $|\mu^{(j)}\rangle \langle \mu^{(j)}|$ e portanto são interpretáveis como probabilidades dos estados mutuamente incoerentes no subsistema considerado, dado que o estado do sistema como um todo seja descrito pelo vetor $|\psi\rangle$ ou, equivalentemente, pelo operador densidade idempotente $\hat{\rho}_\psi$.

2.3 Não idempotência e medidas entrópicas de emaranhamento.

A decomposição de Schmidt mostra claramente que se o operador densidade reduzido para o primeiro subsistema $\hat{\rho}_\psi^{(1)}$ é idempotente, isto é, $\hat{\rho}_\psi^{(1)} = \left(\hat{\rho}_\psi^{(1)} \right)^2$, então ele tem apenas um autovalor não nulo e igual a 1, e o mesmo vale para o operador reduzido para o segundo subsistema, $\hat{\rho}_\psi^{(2)}$. Nesse caso a decomposição do vetor de estado para o sistema composto tem um único termo fatorizado e esse vetor não é emaranhado:

$$|\psi\rangle = |\mu^{(1)} = 1\rangle \otimes |\mu^{(2)} = 1\rangle.$$

Por outro lado, se $|\psi\rangle$ é fatorizável, então claramente os operadores reduzidos $\hat{\rho}_\psi^{(j)}$ são idempotentes. A idempotência dos operadores densidade reduzidos é portanto equivalente à fatorabilidade de $|\psi\rangle$, e consequentemente a sua *não idempotência* sinaliza o emaranhamento do vetor de estado:

$$\hat{\rho}_\psi^{(j)} \neq \left(\hat{\rho}_\psi^{(j)} \right)^2 \Leftrightarrow |\psi\rangle \text{ emaranhado.}$$

Medidas do ‘grau de emaranhamento’ dos dois subsistemas quando o estado do sistema composto é descrito por $|\psi\rangle$ podem, desse modo, ser definidas em termos de medidas do ‘grau de não idempotência’ dos operadores densidade reduzidos. É conveniente que essas medidas sejam independentes da particular base em que os operadores reduzidos sejam representados, o que pode ser conseguido utilizando traços. Medidas frequentemente utilizadas:

1. Entropia de von Neumann:

$$S[\hat{\rho}_\psi^{(j)}] \equiv -\text{Tr} \left[\hat{\rho}_\psi^{(j)} \log_2 \hat{\rho}_\psi^{(j)} \right] = -\sum_{\mu} p_{\mu} \log_2 p_{\mu} \geq 0.$$

2. Entropia linear:

$$S_1[\hat{\rho}_\psi^{(j)}] \equiv \text{Tr} \left[\hat{\rho}_\psi^{(j)} \right] - \text{Tr} \left[\left(\hat{\rho}_\psi^{(j)} \right)^2 \right] = 1 - \sum_{\mu} p_{\mu}^2 \geq 0.$$

3. Entropia “2-Rényi”:

$$S_R[\hat{\rho}_\psi^{(j)}] \equiv -\log_2 \left(\text{Tr} \left[\left(\hat{\rho}_\psi^{(j)} \right)^2 \right] \right) = -\log_2 \left(\sum_{\mu} p_{\mu}^2 \right) \geq 0.$$

Nessas expressões \log_2 indica logaritmos na base 2. A escolha dessa base é algo arbitrária no sentido que diferentes bases correspondem essencialmente a diferentes escalas. A entropia de von Neumann com logaritmo na base 2 pode ser vista como expressa em ‘bits’.

O valor de cada uma dessas medidas não depende do subsistema j considerado por envolverem unicamente os autovalores p_{μ} e pelo fato de que os dois operadores reduzidos têm os mesmos autovalores não nulos.

As entropias S_1 e S_R são casos particulares (para $\alpha = 2$) de duas famílias de entropias dependentes de um parâmetro $\alpha \geq 0$, a saber

$$S_1^{(\alpha)} = \frac{1}{\alpha - 1} \left(1 - \text{Tr} \left[\left(\hat{\rho}_\psi^{(j)} \right)^{\alpha} \right] \right) \quad \text{e} \quad S_R^{(\alpha)} = \frac{1}{1 - \alpha} \log \left(\text{Tr} \left[\left(\hat{\rho}_\psi^{(j)} \right)^{\alpha} \right] \right).$$

Essas entropias são chamadas respectivamente entropia de Tsallis e entropia de Rényi, e se reduzem (ambas) à entropia de von Neumann para $\alpha = 1$. A entropia linear seria mais especificamente a entropia “2-Tsallis” (i.e., para $\alpha = 2$). Diferentes escolhas podem ser pensadas como diferentes ‘escalas’ para a quantificação do emaranhamento. Uma ilustração da diferença entre escalas pode ser encontrada no exemplo A) abaixo.

As entropias de von Neumann S e de 2-Rényi S_R são aditivas, isto é

$$S \left[\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)} \right] = S \left[\hat{\rho}^{(1)} \right] + S \left[\hat{\rho}^{(2)} \right],$$

onde os $\hat{\rho}^{(j)}$ são operadores densidade quaisquer, valendo uma relação idêntica também para S_R . Todas as entropias de Tsallis com $\alpha \neq 1$ são porém não aditivas. No caso da entropia linear, de fato, é imediato verificar que

$$S_1 \left[\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)} \right] = S_1 \left[\hat{\rho}^{(1)} \right] + S_1 \left[\hat{\rho}^{(2)} \right] - S_1 \left[\hat{\rho}^{(1)} \right] S_1 \left[\hat{\rho}^{(2)} \right].$$

Propriedades comuns às três medidas: 1) O valor mínimo (zero) é atingido para densidades reduzidas idempotentes, e portanto indica ausência de emaranhamento.

2) O valor máximo corresponde a autovalores (probabilidades) p_{μ} iguais entre si (ou independentes de μ), tendo em conta a condição sobre o traço, ou seja $\text{Tr} \left(\hat{\rho}^{(j)} \right) = \sum_{\mu} p_{\mu} = 1$. Isso corresponde a subsistemas descritos por operadores densidade maximamente incoerentes e a estados maximamente emaranhados do sistema composto. Se o espaço de fase de menor dimensão tem dimensão finita N , então para $p_{\mu} = 1/N$

$$S^{\max}[\hat{\rho}_\psi^{(j)}] = \log N, \quad S_1^{\max}[\hat{\rho}_\psi^{(j)}] = \frac{N-1}{N} \quad \text{e} \quad S_R^{\max}[\hat{\rho}_\psi^{(j)}] = \log N.$$

Para $N \rightarrow \infty$ apenas a entropia linear permanece limitada.

Para a matriz densidade idempotente que descreve o estado do sistema composto como um todo, é claro que as entropias se anulam. Portanto, para tais estados do sistema composto, e para qualquer das opções de definição da entropia, $S[\hat{\rho}_\psi] = 0 \leq S[\hat{\rho}_\psi^{(j)}]$, sendo que a igualdade vale se e somente se o estado do sistema composto *não* for emaranhado.

Exemplos: A) Emaranhamento dinâmico de dois spins. Neste caso (cf. pag. 10) as densidades reduzidas são diagonais para qualquer valor de t , $N = 2$ e os autovalores de $\hat{\rho}_{(1)}$ (por exemplo) são

$$\begin{aligned} p_1(t) &= |\cos^2 \alpha e^{-i\omega t} + \sin^2 \alpha|^2 = \cos^4 \alpha + \sin^4 \alpha + 2\sin^2 \alpha \cos^2 \alpha \cos \omega t, \\ p_2(t) &= \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha |e^{-i\omega t} - 1|^2 = 2\sin^2 \alpha \cos^2 \alpha (1 - \cos \omega t). \end{aligned}$$

É claro que $p_1(t) + p_2(t) = 1$ para qualquer t e que $p_1(2n\pi) = 1$, $p_2(2n\pi) = 0$ (ausência de emaranhamento para estes tempos). As três entropias podem ser calculadas facilmente como funções de t , com resultados como os mostrados na fig. 1.

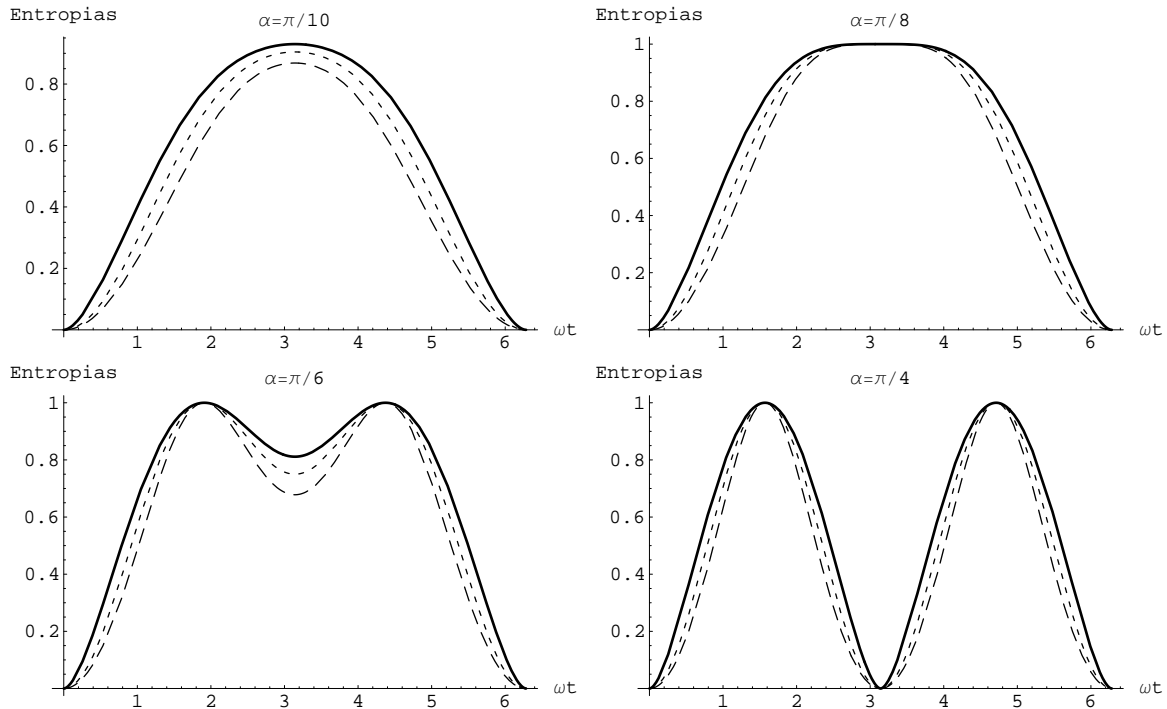


Figura 1: Entropias (S : linha cheia; $2S_1$: linha pontilhada; S_R : linha tracejada) como funções de ωt para alguns valores do ângulo α (indicados na figura). Para este caso $N = 2$, $S^{\max} = S_R^{\max} = \log_2 2 = 1$ e $S_1^{\max} = 0.5$ ($2S_1^{\max} = 1$). Para $\alpha = \pi/4$ o estado inicialmente fatorizável do sistema de dois spins volta a ser fatorizável (entropias nulas) para $\omega t = \pi$, v. pag. 10.

Características presentes neste exemplo que são de validade geral: 1) A evolução *unitária* do estado do sistema composto (autonomo) com o tempo induz uma evolução das densidades reduzidas (que descrevem o estado de cada um dos subsistemas) na qual os respectivos *autovalores* variam com o tempo, embora preservando as condições gerais de não negatividade e de normalização do traço. Isso significa que a lei efetiva de evolução com o tempo das densidades reduzidas (induzida pela evolução unitária do sistema composto como um todo) é em geral de natureza *não unitária*, embora dotada de propriedades suficientes para a preservação da não negatividade e normalização do traço; 2) a não unitariedade assim caracterizada provém dos termos do hamiltoniano que representam interações capazes de induzir emaranhamento entre os subsistemas.

B) Estados maximamente emaranhados de dois spins. É possível escrever quatro estados de dois spins que são maximamente emaranhados (para os quais as entropias assumem o valor máximo):

$$\begin{aligned} |B_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle \right), & |B_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \right), \\ |B_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \right), & \text{e } |B_4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle - \left| -\frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle \right). \end{aligned} \quad (2)$$

Estes quatro estados, chamados estados de Bell, são ortonormais e constituem portanto uma base (maximamente emaranhada) para o sistema de dois spins. Eles têm a propriedade notável de que é possível transformar qualquer um deles em qualquer outro através de uma operação unitária que age sobre um dos spins apenas, $\hat{u}^{(1)} \otimes \hat{1}_2$. De fato, em termos de $\sigma^{(1)} = 2\mathbf{s}^{(1)}/\hbar$

$$\left(\hat{\sigma}_3^{(1)} \otimes \hat{1}_2 \right) |B_1\rangle = |B_4\rangle, \quad \left(\hat{\sigma}_1^{(1)} \otimes \hat{1}_2 \right) |B_1\rangle = |B_2\rangle, \quad \left(i\hat{\sigma}_2^{(1)} \otimes \hat{1}_2 \right) |B_3\rangle = |B_2\rangle, \quad \text{etc.}$$

Os estados de Bell se relacionam com os vetores da base produto $|m_1 m_2\rangle$ por uma transformação unitária U_B cujas colunas (na base produto $|m_1 m_2\rangle$, ordenada como na pag. 9) são os vetores $|B_n\rangle$:

$$\{ \langle m'_1 m'_2 | U_B | m_1 m_2 \rangle \} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Essa matriz leva os vetores da base produto aos estados de Bell como escritos acima, por exemplo $U_B |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle = |B_1\rangle$. É claro que outros ordenamentos ou fases são possíveis, levando a matrizes unitárias análogas. Também neste caso, como feito na pag. 9, é possível usar a transformação unitária U_B para definir novos spins em termos dos quais os estados de Bell aparecem de forma fatorada. De fato, definindo

$$\hat{\Sigma}^{(1)} = U_B \left(\hat{\mathbf{s}}^{(1)} \otimes \hat{1}_2 \right) U_B^{-1} \quad \text{e} \quad \hat{\Sigma}^{(2)} = U_B \left(\hat{1}_1 \otimes \hat{\mathbf{s}}^{(2)} \right) U_B^{-1}$$

resulta

$$\begin{aligned} \langle B_{n'} | \hat{\Sigma}_z^{(1)} | B_n \rangle &= \langle m'_1 m'_2 | U_B^{-1} \hat{\Sigma}_z^{(1)} U_B | m_1 m_2 \rangle = \langle m'_1 m'_2 | \hat{s}_z^{(1)} \otimes \hat{1}_2 | m_1 m_2 \rangle = \hbar m_1 \delta_{m'_1 m_1} \delta_{m'_2 m_2} = \\ &= \hbar m_1 \delta_{nm'} \end{aligned}$$

e um resultado análogo para $\hat{\Sigma}_z^{(2)}$, de modo que $|B_1\rangle = |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle_\Sigma$, etc. Portanto os estados de Bell são autovetores comuns de $\hat{\Sigma}_z^{(1)}$ e $\hat{\Sigma}_z^{(2)}$ com autovalores $\pm\hbar/2$, e constituem uma base produto $\{|m_1 m_2\rangle_\Sigma\}$ em uma nova fatorização do espaço de dois spins, $\mathcal{H}_{\Sigma_1} \otimes \mathcal{H}_{\Sigma_2}$.

O particular ordenamento adotado acima para a base de Bell e para a base produto $\{|m_1 m_2\rangle\}$ leva ainda ao resultado de que os estados desta base são por sua vez estados de Bell quando expressos em termos da base produto $\{|m_1 m_2\rangle_\Sigma\}$. Por exemplo,

$$|\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|B_1\rangle + |B_4\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle_\Sigma + |-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle_\Sigma), \quad \text{etc.}$$

Essa reciprocidade, no entanto, pode ser destruída por um simples reordenamento de uma das duas bases na construção da transformação unitária U_B .

C) Entropia linear para o elétron no átomo de hidrogênio. O modelo simples do átomo de hidrogênio como um sistema ligado de dois corpos em seu estado interno fundamental é um caso de um sistema emaranhado em que os espaços \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 têm dimensão infinita, mas no qual, com algum trabalho é possível calcular elementarmente a matriz densidade reduzida para uma das partículas, por exemplo, para o elétron, tratado como partícula 1. Além disso, tratando-se de um sistema composto cujo espectro é contínuo, é preciso pelo menos tomar certos cuidados com a questões de normalização. A providência mais simples (adotada aqui) é usar condições de contorno periódicas em um volume Ω para a função de onda do centro de massa, supondo Ω suficientemente grande para dispensar outras providências com relação ao movimento relativo[1]. O resultado assim obtido para a matriz densidade reduzida é

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^{(1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) &= \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \int_{\Omega} d\mathbf{r}_2 \langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \psi_E \rangle \langle \psi_E | \mathbf{r}'_1 \mathbf{r}_2 \rangle = \frac{e^{i \frac{m_1}{m_1+m_2} \mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1)}}{\Omega \pi a_0^3} \int_{\Omega} d\mathbf{r}_2 e^{-\frac{1}{a_0} (|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| + |\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_2|)} = \\ &= \frac{1}{\Omega} e^{i \frac{m_1}{m_1+m_2} \mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) - \frac{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1|}{a_0}}; \quad \text{Notar que} \quad \text{Tr} [\hat{\rho}^{(1)}] = \int_{\Omega} d\mathbf{r}_1 \hat{\rho}^{(1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) = 1. \end{aligned}$$

Esse resultado depende apenas da diferença $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1$ e é portanto invariante por translações, mas por outro lado depende explicitamente do volume de quantização Ω . Essa dependência desaparece na cálculo do traço da densidade reduzida, mas a entropia linear envolve o traço do quadrado da densidade reduzida, ou seja

$$\text{Tr} \left[\left(\hat{\rho}^{(1)} \right)^2 \right] = \int_{\Omega} d\mathbf{r}_1 \int_{\Omega} d\mathbf{r}'_1 \hat{\rho}^{(1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) \hat{\rho}^{(1)}(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_1) = \frac{\pi a_0^3}{\Omega},$$

que agora depende do volume de quantização e decresce a zero quando $\Omega \rightarrow \infty$, indicando que a entropia linear tende ao seu valor máximo nesse limite. Como pode ser verificado explicitamente, ondas planas $e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} / \Omega$ são autofunções da densidade reduzida (isto é uma consequência direta da invariança translacional apenas), com autovalores dados por

$$\tilde{\rho}_{\mathbf{K}=0}^{(1)}(\mathbf{k}_1) = \frac{8\pi a_0^3}{\Omega(1 + a_0^2 k_1^2)^2}$$

no caso $\mathbf{K} = 0$. O efeito de $\mathbf{K} \neq 0$ se reduz a uma translação $\mathbf{k}_1 \rightarrow \mathbf{k}_1 - \frac{m_1}{m_1+m_2} \mathbf{K}$. O traço ($= 1$) da densidade reduzida é também obtido somando esta expressão sobre \mathbf{k}_1 (ou calculando $\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}_1$), etc.

3. Realidade do emaranhamento.

O que precede coincide nos pontos essenciais com o cenário para o emaranhamento quântico tal como exposto por Schrödinger imediatamente após a publicação do famoso trabalho de Einstein, Podolski e Rosen[2] em 1935. Na época, Schrödinger escreveu ainda:

Indubitably the situation described here is, in present quantum mechanics, a necessary and indispensable feature. The question arises whether it is so in Nature too. I am not satisfied about there being sufficient experimental evidence for that[3],(1936).

A evidência experimental de que as coisas são de fato assim também na natureza aumentou enormemente desde então, em particular vindo a associar as correlações quânticas entre subsistemas associadas ao emaranhamento quântico à violação (experimentalmente testável) de limites que seriam impostos, grosseiramente falando, pela sua ausência ('desigualdades de Bell'). Ao mesmo tempo, a percepção de potenciais usos do emaranhamento como 'recurso' para transmissão, proteção e processamento de informação levou a uma expansão considerável do cenário original, embora o terreno novo tenha se revelado muito máis árduo e traiçoeiro que o esperado, inclusive em termos puramente teóricos. Os problemas práticos em implementar tais usos, por outro lado, são atribuídos também a processos de emaranhamento, espúrios e indesejáveis no contexto das aplicações, mas alçados à situação de serem eventualmente capazes de dar conta da aparência tão predominantemente 'clássica' do mundo macroscópico ('decoerência').

3.1 O argumento EPR e a sua variante segundo Bohm.

O objetivo do argumento de EPR[2] é fundamentar a idéia de que a MQ é uma teoria pelo menos 'incompleta'. Para isso, cuidado especial é dedicado a uma especificação precisa do que seja uma teoria 'completa', após o que é dado um argumento (envolvendo um sistema ideal) mostrando que a MQ não pode ser declarada completa. E é nesse argumento que coloca pela primeira vez, embora sem menção explícita, a questão do emaranhamento e de suas consequências. A explicitação e a denominação do emaranhamento de fato são devidas à elaboração feita por Schrödinger do trabalho de EPR[3].

DEFINIÇÕES: 1. *Elemento de realidade* (caracterização *suficiente*): "Se, sem perturbar de qualquer forma o sistema, podemos prever com certeza (i.e. com probabilidade 1) o valor de uma quantidade física, então existe um elemento de realidade física correspondente a essa quantidade física."

2. *Teoria completa*: Uma teoria é completa quando ela contém previsões para todos os elementos de realidade.

HIPÓTESE CRUCIAL: não há ação à distância na natureza, isto é, não pode haver influência mútua entre partes separadas espacialmente.

SISTEMA: duas partículas separadas espacialmente cujo estado conjunto é preparado de forma que $\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2$ e $\hat{\mathbf{q}} = \hat{\mathbf{q}}_1 - \hat{\mathbf{q}}_2$ tenham valores bem definidos $\mathbf{0}$ e \mathbf{a} respectivamente (isso é possível devido à compatibilidade dessas duas variáveis dinâmicas).

O fato de que as variáveis dinâmicas usadas por EPR têm espectro puramente contínuo faz com que a 'função de onda' que descreve o estado quântico considerado seja de fato um objeto extremamente singular, fato ao qual não é no entanto dada maior importância no trabalho. Alternativamente ao tratamento apresentado lá, o confinamento gaussiano da posição relativa $\hat{\mathbf{q}}$ ao valor \mathbf{a} com momento total zero corresponde à função de onda

$$\psi_{EPR}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left(\frac{1}{2\pi\sqrt{\pi b}} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 - \mathbf{a})^2}{2b^2}}, \quad (3)$$

que é translacionalmente invariante e claramente não fatorizável. A condição de momento total zero corresponde à não dependência da variável conjugada, que é a posição do centro de massa $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ (supondo massas iguais), levando à invariância translacional da função de onda ψ_{EPR} . O seu fator de normalização inclui um fator $(2\pi)^{-\frac{3}{2}}$ correspondente a uma onda plana do centro de massa com momento total zero, normalizada à la Dirac em termos de vetores de onda $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$. A situação considerada por EPR corresponde ainda ao limite $b \rightarrow 0$ dessa função de onda, o que leva essencialmente a algo que pode ser representado simbolicamente por $[\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 - \mathbf{a})]^{\frac{1}{2}}$. Essa notação significa simplesmente que a densidade de probabilidade para a variável relativa $\mathbf{q} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ está concentrada no ponto $\mathbf{q} = \mathbf{a}$ como $\delta(\mathbf{q} - \mathbf{a})$.

ARGUMENTO: a) Uma *possível* medida da posição $\hat{\mathbf{q}}_1$, \mathbf{r}_1 , determina a posição $\hat{\mathbf{q}}_2$ como $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 - \mathbf{a}$ sem que a segunda partícula seja afetada de qualquer forma (por estar espacialmente separada da primeira). Portanto, segundo o critério suficiente acima, a posição da segunda partícula corresponde a um elemento de realidade.

b) Uma *possível* medida do momento $\hat{\mathbf{p}}_1$, \mathbf{p}_1 , determina o valor de $\hat{\mathbf{p}}_2$, $\mathbf{p}_2 = -\mathbf{p}_1$, também sem que a segunda partícula seja afetada de qualquer forma, e portanto corresponde também a um elemento de realidade.

c) A posição e o momento da partícula 2 correspondem a observáveis que não comutam, e portanto a função de onda não pode conter informação sobre os valores de $\hat{\mathbf{p}}_2$ e $\hat{\mathbf{q}}_2$ que, no entanto, correspondem a elementos de realidade. Portanto a MQ não é completa.

No trabalho de EPR é observado ainda que poder-se-ia objetar que duas quantidades físicas deveriam ser consideradas simultaneamente elementos de realidade “apenas quando elas pudessem ser medidas ou preditas simultaneamente”. Como não é possível medir simultaneamente \mathbf{q}_1 e \mathbf{p}_1 , a predição simultânea de \mathbf{q}_2 e \mathbf{p}_2 é por sua vez impossível. Essa objeção é no entanto rejeitada observando que

[this] makes the reality of $[\mathbf{p}_2]$ and $[\mathbf{q}_2]$ dependent upon the process of measurement carried out on the first system, which does not disturb the second system in any way. No reasonable definition of reality could be expected to permit this.

Desse modo, a posição adotada por EPR é claramente a de que a realidade de \mathbf{p}_2 e \mathbf{q}_2 decorre apenas da possibilidade, em princípio, de poder conduzir um *ou* outro procedimento, nenhum dos quais perturba a segunda partícula de qualquer modo (cf. a discussão desse ponto em Clauser e Shimony[4]). Bohr[5] de certa forma se apoiou neste ponto em sua refutação da conclusão de EPR. Admitindo a impossibilidade de ação à distância, Bohr diz no entanto que “existe a questão de uma influência sobre as próprias condições que definem os tipos possíveis de predições acerca do comportamento futuro do sistema”.

O ingrediente crucial da contribuição de Bell à questão da validade ou não do argumento de EPR consistiu em recolocá-la em um contexto quantitativo acessível à experiência. Isso foi feito não em termos de sistemas com observáveis de espectro contínuo, mas envolvendo variáveis dinâmicas discretas muito mais simples (spins) na variante do argumento usada por Bohm em seu texto de MQ. Nessa versão, o estado (3) é substituído pelo estado $|B_3\rangle$ de Bell (v. eq. (2))

$$|B_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle - \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \right)$$

que é um estado puro maximamente emaranhado dos dois spins⁶ no qual o valor do observável $(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \mathbf{u}) \otimes \hat{\mathbf{I}}_2$ é maximamente indefinido (probabilidade 1/2 para cada um dos dois valores possíveis), mas no qual a medida do valor $\hbar m_1$ desse observável determina completamente o valor de $\hat{\mathbf{I}}_1 \otimes (\hat{\mathbf{s}}_2 \cdot \mathbf{v})$ como $\hbar m_2 = -\hbar m_1$, qualquer que seja a direção escolhida para o vetor unitário \mathbf{u} . De fato, para quaisquer duas direções \mathbf{u} e \mathbf{v} é fácil verificar que

$$\langle B_3 | [(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \mathbf{u}) \otimes (\hat{\mathbf{s}}_2 \cdot \mathbf{v})] | B_3 \rangle = -\frac{\hbar^2}{4} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \quad \text{ou} \quad \langle B_3 | [(\hat{\sigma}_1 \cdot \mathbf{u}) \otimes (\hat{\sigma}_2 \cdot \mathbf{v})] | B_3 \rangle = -\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \quad (4)$$

com $\hat{\sigma}_i = 2\hat{\mathbf{s}}_i/\hbar$, e portanto, em particular,

$$\langle B_3 | [(\hat{\sigma}_1 \cdot \mathbf{u}) \otimes (\hat{\sigma}_2 \cdot \mathbf{u})] | B_3 \rangle = -1. \quad (5)$$

Essa correlação é análoga à do sistema de duas partículas considerado por EPR: a determinação de m_1 (cujos valores possíveis são $\pm 1/2$) dá imediatamente $m_2 = -m_1$, e em geral $\hat{\sigma}_1 \cdot \mathbf{u}$ e $\hat{\sigma}_1 \cdot \mathbf{v}$ não comutam para $\mathbf{u} \neq \mathbf{v}$.

3.2 Desigualdades de Bell e ‘realismo local’.

O ponto de vista adotado por Bell em 1964[6] consiste na suposição de que a eventual incompletude da MQ poderia ser suprida pela existência de variáveis, necessárias para caracterizar completamente os estados de um dado sistema, que seriam *adicionais* às variáveis dinâmicas consideradas no contexto dessa teoria. A explicitação dessas variáveis poderia então levar a uma teoria completa no sentido de EPR, que reproduzisse a informação acessível através da MQ quando fossem tomadas médias sobre as variáveis adicionais, com pesos determinados pela especificação completa dos estados.

O resultado obtido mostra incompatibilidade quantitativa, e portanto em princípio suscetível a testes experimentais, entre certas previsões *estatísticas* de teorias ‘completas’ com variáveis adicionais e as previsões correspondentes da MQ. A obtenção de tal resultado *não* depende da construção explícita de teorias com variáveis adicionais, mas apenas de hipóteses que garantam propriedades gerais suficientes com vistas ao critério de completude. O seu alcance e validade está portanto vinculado, em particular, a tais hipóteses⁷.

SISTEMA: dois spins, separados espacialmente, preparados no estado maximamente emaranhado $|B_3\rangle$. Esse estado é na realidade o estado de spin total zero (ou ‘singlete’) do sistema de dois spins. As propriedades (4) e (5) refletem, em particular, a invariância rotacional desse estado do sistema composto de dois spins.

HIPÓTESE DE ‘REALISMO LOCAL’: como o valores de $\hat{\sigma}_2 \cdot \mathbf{u}$ podem ser inferidos da medida de $\hat{\sigma}_1 \cdot \mathbf{u}$, pode-se supor que esses valores sejam de fato *pre-determinados* por uma especificação do estado mais completa que a representação da MQ (*realismo*). Tal especificação é feita através de parâmetros adicionais denotados coletivamente por λ . Os observáveis são então

⁶A não normalizabilidade do estado considerado por EPR (que implica a não finitude do traço do operador densidade a ele associado) não permite a avaliação de ‘emaranhamento máximo’ em termos das medidas entrópicas introduzidas acima. Note, no entanto, que a correlação (ou anti-correlação) perfeita entre valores de observáveis dos dois subsistemas é comum aos dois casos.

⁷O tratamento dado a seguir e na próxima seção segue de perto as apresentações originais de Bell. Uma apresentação algo mais técnica e muito mais explícita e completa quanto às sutilezas matemáticas envolvidas pode ser encontrada na ref. [7].

$$\begin{cases} \hat{\sigma}_1 \cdot \mathbf{u} \longrightarrow A_{\mathbf{u}}(\lambda), & \text{valores de } A_{\mathbf{u}}(\lambda) = \pm 1, \\ \hat{\sigma}_2 \cdot \mathbf{v} \longrightarrow B_{\mathbf{v}}(\lambda), & \text{valores de } B_{\mathbf{v}}(\lambda) = \pm 1. \end{cases} \quad (6)$$

Ponto crucial (*localidade*): $A_{\mathbf{u}}(\lambda)$ não depende de \mathbf{v} e $B_{\mathbf{v}}(\lambda)$ não depende de \mathbf{u} , isto é, o resultado em cada subsistema depende apenas do estado do sistema composto (através de λ) e do arranjo experimental local para cada um deles; para a medida conjunta dos dois spins

$$(\hat{\sigma}_1 \cdot \mathbf{u} \otimes \hat{\sigma}_2 \cdot \mathbf{v}) \longrightarrow (A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}})(\lambda) = A_{\mathbf{u}}(\lambda)B_{\mathbf{v}}(\lambda)$$

VALORES MÉDIOS DA MQ: Se $\rho(\lambda)$ é a distribuição das variáveis adicionais λ no estado considerado ($|B_3\rangle$ no caso), $\int d\lambda \rho(\lambda) = 1$, e se a teoria ‘realista’ envolvendo essas variáveis mantém os resultados estatísticos da MQ deve-se ter sempre

$$\langle B_3 | [(\hat{\sigma}_1 \cdot \mathbf{u}) \otimes (\hat{\sigma}_2 \cdot \mathbf{v})] | B_3 \rangle = -\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \int d\lambda \rho(\lambda) A_{\mathbf{u}}(\lambda) B_{\mathbf{v}}(\lambda), \quad (7)$$

o que, no entanto, Bell mostrou que *não é possível*. Nos termos propostos, esse fato implica a impossibilidade de uma teoria ‘realista e local’ que seja inteiramente consistente com os resultados da MQ.

DEMONSTRAÇÃO DE BELL (1964)[6]: para que a integral em (7) possa se reduzir a -1 no caso $\mathbf{u} = \mathbf{v}$ é preciso que $B_{\mathbf{v}}(\lambda) = -A_{\mathbf{v}}(\lambda)$ para quase todo λ . Supondo isso,

$$\langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}} \rangle \equiv \int d\lambda \rho(\lambda) A_{\mathbf{u}}(\lambda) B_{\mathbf{v}}(\lambda) = - \int d\lambda \rho(\lambda) A_{\mathbf{u}}(\lambda) A_{\mathbf{v}}(\lambda). \quad (8)$$

Então, sendo \mathbf{w} uma terceira direção, e tendo em conta os valores possíveis dados em (6),

$$\begin{aligned} \langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}} \rangle - \langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{w}} \rangle &= - \int d\lambda \rho(\lambda) [A_{\mathbf{u}}(\lambda)A_{\mathbf{v}}(\lambda) - A_{\mathbf{u}}(\lambda)A_{\mathbf{w}}(\lambda)] = \\ &= - \int d\lambda \rho(\lambda) A_{\mathbf{u}}(\lambda) A_{\mathbf{v}}(\lambda) [1 - A_{\mathbf{v}}(\lambda)A_{\mathbf{w}}(\lambda)]. \end{aligned} \quad (9)$$

Tomando módulos resulta a desigualdade

$$|\langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}} \rangle - \langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{w}} \rangle| \leq \int d\lambda \rho(\lambda) [1 - A_{\mathbf{v}}(\lambda)A_{\mathbf{w}}(\lambda)]$$

ou seja

$$|\langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}} \rangle - \langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{w}} \rangle| \leq 1 + \langle A_{\mathbf{v}}B_{\mathbf{w}} \rangle. \quad (10)$$

Essa desigualdade não é satisfeita pelos valores médios dados pela MQ. Por exemplo, se \mathbf{u} é ao longo do eixo z , \mathbf{v} e \mathbf{w} estão no plano xz e fazem ângulos de $\pi/3$ e $2\pi/3$ com o eixo z ,

$$\begin{cases} \langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}} \rangle \rightarrow -\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = -\frac{1}{2} \\ \langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{w}} \rangle \rightarrow -\mathbf{u} \cdot \mathbf{w} = \frac{1}{2} \\ \langle A_{\mathbf{v}}B_{\mathbf{w}} \rangle \rightarrow -\mathbf{v} \cdot \mathbf{w} = -\frac{1}{2} \end{cases}$$

o que dá 1 para o lado esquerdo e 1/2 para o lado direito.

OUTRA DESIGUALDADE. Esse resultado específico é apenas um exemplo (que foi o primeiro) de uma série de relações (que têm tipicamente a forma de desigualdades) dedutíveis de hipóteses envolvendo teorias ‘realistas’ (no sentido de admitirem a pre-determinação completa pelo estado do sistema dos resultados de medidas feitas sobre suas partes) que são violadas pela MQ. Uma outra desigualdade, envolvendo exatamente o mesmo sistema e as mesmas hipóteses acima (eqs. (4) a (6)) foi usada por Mermin[8] e por Nelson[9] para exposições ‘completamente não técnicas’ das peculiaridades da MQ relacionadas ao emaranhamento:

a) A condição de anti-correlação completa (5) permite em todos os casos eliminar as variáveis $B(\lambda)$ em favor das variáveis $A(\lambda)$ correspondentes à mesma direção. Desse modo, todas as correlações realistas envolvendo duas direções diferentes de três direções \mathbf{u} , \mathbf{v} e \mathbf{w} podem ser obtidas considerando apenas os valores possíveis de $A_{\mathbf{u}}$, $A_{\mathbf{v}}$ e $A_{\mathbf{w}}$.

b) Há duas possibilidades distintas para esses valores que são relevantes para os valores as correlações de pares de direções distintas: os três são iguais ou um é diferente dos outros dois. No primeiro caso o valor de qualquer par $A_j A_k$, $j, k = \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}$, $j \neq k$ é $+1$ e portanto $A_j B_k = -1$. No segundo caso $A_j B_k$ é -1 para duas das seis escolhas possíveis de j e k , e $+1$ nas outras quatro. Disso resulta então que

$$-1 \leq \langle A_j B_k \rangle \leq \frac{1}{3}, \quad j, k = \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}, \quad j \neq k.$$

A MQ, no entanto, pode violar essas desigualdades. Por exemplo para \mathbf{u} , \mathbf{v} e \mathbf{w} no plano xz e fazendo ângulos de 0 , $2\pi/3$ e $4\pi/3$ com o eixo z , caso em que $\langle A_{\mathbf{u}} B_{\mathbf{v}} \rangle = \langle A_{\mathbf{u}} B_{\mathbf{w}} \rangle = \langle A_{\mathbf{v}} B_{\mathbf{w}} \rangle = 1/2$. Note que esses valores *não* violam a desigualdade original de Bell, eq. (10).

3.3 Desigualdades mais gerais.

A limitação mais severa das desigualdades acima provém do fato de que, na sua dedução, é feito uso essencial da existência de (anti-)correlação perfeita entre resultados obtidos nos dois subsistemas, que torna sua aplicabilidade bastante restrita, pois esse tipo de correlação não é genérica para estados emaranhados. Essa limitação foi removida por Clauser, Horne, Shimony e Holt (CHSH)[10] em 1969, obtendo uma nova desigualdade com hipóteses menos restritivas. A hoje comumente chamada desigualdade CHSH foi em 1971 rededuzida por Bell[11], com uma nova afinação para as hipóteses envolvidas. A dedução dada por Bell em 1971 segue passos semelhantes aos usados na dedução da desigualdade de 1964, embora evitando a hipótese de correlação completa e considerando correlações envolvendo não apenas três, mas quatro (dois pares) de direções distintas, \mathbf{u} e \mathbf{u}' para o primeiro subsistema e \mathbf{v} e \mathbf{v}' para o segundo. O ponto de partida envolve médias semelhantes às escritas em (8):

$$\langle A_{\mathbf{u}} B_{\mathbf{v}} \rangle = \int d\lambda \rho(\lambda) \bar{A}_{\mathbf{u}}(\lambda) \bar{B}_{\mathbf{v}}(\lambda). \quad (11)$$

Segundo Bell, as quantidades $\bar{A}_{\mathbf{u}}(\lambda)$ e $\bar{B}_{\mathbf{v}}(\lambda)$ diferem de $A_{\mathbf{u}}(\lambda)$ e $B_{\mathbf{v}}(\lambda)$ por médias sobre “variáveis ocultas” que permitem “indeterminismo com um certo caráter local” nos sistemas de medida. Ou, segundo a versão de Clauser e Shimony[4], permite que em algumas das oportunidades um, outro ou os dois os sistemas de detecção não registrem nenhum dos dois valores possíveis ± 1 , situação a que é atribuído o valor zero. Dessa forma, o que se tem é

$$|\bar{A}_{\mathbf{u}}(\lambda)| \leq 1 \quad \text{e} \quad |\bar{B}_{\mathbf{v}}(\lambda)| \leq 1, \quad (12)$$

e essas são as relações que servirão de base para o restante da dedução. A equação (10) é substituída por

$$\begin{aligned}
\langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}} \rangle - \langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}'} \rangle &= \int d\lambda \rho(\lambda) [\bar{A}_{\mathbf{u}}(\lambda)\bar{B}_{\mathbf{v}}(\lambda) - \bar{A}_{\mathbf{u}}(\lambda)\bar{B}_{\mathbf{v}'}(\lambda)] = \\
&= \int d\lambda \rho(\lambda)\bar{A}_{\mathbf{u}}(\lambda)\bar{B}_{\mathbf{v}}(\lambda) [1 \pm \bar{A}_{\mathbf{u}'}(\lambda)\bar{B}_{\mathbf{v}'}(\lambda)] - \\
&\quad - \int d\lambda \rho(\lambda)\bar{A}_{\mathbf{u}}(\lambda)\bar{B}_{\mathbf{v}'}(\lambda) [1 \pm \bar{A}_{\mathbf{u}'}(\lambda)\bar{B}_{\mathbf{v}}(\lambda)]. \tag{13}
\end{aligned}$$

Então, devido às relações (12),

$$|\langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}} \rangle - \langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}'} \rangle| \leq \int d\lambda \rho(\lambda) [1 \pm \bar{A}_{\mathbf{u}'}(\lambda)\bar{B}_{\mathbf{v}'}(\lambda)] + \int d\lambda \rho(\lambda) [1 \pm \bar{A}_{\mathbf{u}'}(\lambda)\bar{B}_{\mathbf{v}}(\lambda)]$$

de onde, usando (11), resulta

$$|\langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}} \rangle - \langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}'} \rangle| \leq 2 \pm [\langle A_{\mathbf{u}'}B_{\mathbf{v}'} \rangle + \langle A_{\mathbf{u}'}B_{\mathbf{v}} \rangle]$$

que é uma das formas da desigualdade buscada. Essa mesma relação pode ser escrita da forma ‘mais simétrica’, segundo Bell,

$$|\langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}} \rangle - \langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}'} \rangle| + |\langle A_{\mathbf{u}'}B_{\mathbf{v}'} \rangle + \langle A_{\mathbf{u}'}B_{\mathbf{v}} \rangle| \leq 2 \tag{14}$$

ou ainda sob a forma de CHSH[4]

$$-2 \leq \langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}} \rangle - \langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}'} \rangle + \langle A_{\mathbf{u}'}B_{\mathbf{v}'} \rangle + \langle A_{\mathbf{u}'}B_{\mathbf{v}} \rangle \leq 2. \tag{15}$$

Escolhas diferentes dentre as direções \mathbf{u} , \mathbf{v} , \mathbf{u}' e \mathbf{v}' ao escrever a relação (13) produzem ainda outras formas dessa desigualdade, em que o sinal negativo (único) aparece em qualquer das quatro funções de correlação envolvidas.

Violação dessa desigualdade pela MQ: Escolhendo \mathbf{u} , \mathbf{v} , \mathbf{u}' e \mathbf{v}' no plano zx , fazendo com o eixo z ângulos respectivamente de $n\pi/4$, $n = 0, 1, 2, 3$, resulta, para o estado singleto de dois spins,

$$\langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}} \rangle = -\langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}'} \rangle = \langle A_{\mathbf{u}'}B_{\mathbf{v}'} \rangle = \langle A_{\mathbf{u}'}B_{\mathbf{v}} \rangle = -\frac{\sqrt{2}}{2},$$

o que dá

$$\begin{aligned}
&|\langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}} \rangle - \langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}'} \rangle| + |\langle A_{\mathbf{u}'}B_{\mathbf{v}'} \rangle + \langle A_{\mathbf{u}'}B_{\mathbf{v}} \rangle| = \\
&= -\langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}} \rangle + \langle A_{\mathbf{u}}B_{\mathbf{v}'} \rangle - \langle A_{\mathbf{u}'}B_{\mathbf{v}'} \rangle - \langle A_{\mathbf{u}'}B_{\mathbf{v}} \rangle = 2\sqrt{2}.
\end{aligned}$$

Utilizando a desigualdade de Cauchy-Schwartz é possível obter diretamente[7] o valor $2\sqrt{2}$ como limite nessa desigualdade no caso da MQ, de modo que esse estado e configuração na realidade saturam esse limite quântico.

Exercício: Mostre que, tomando $\mathbf{u}' = \mathbf{v}' = \mathbf{w}$ e supondo $\langle A_{\mathbf{w}}B_{\mathbf{w}} \rangle = -1$ na desigualdade acima resulta a desigualdade (10).

- Testes experimentais[12].
- Leggett[13], em 2003, obtém desigualdades tipo Bell para ‘formas aceitáveis’ de ‘realismo não local’; teste experimental realizado por Zeilinger[14], em 2007, inclui teste simultâneo de ‘realismo local’ (desigualdade CHSH) e mostra violação simultânea (i.e., nos mesmos dados) das desigualdades referentes aos dois tipos de realismo.

4. - Sistemas compostos em estados mistos[15, 16] e o ‘ambiente’ como terceiro subsistema.

O emaranhamento em um sistema composto bipartido foi tratado, até aqui, supondo que o sistema composto como um todo se encontre em um estado quântico puro. Uma situação em que a consideração de sistemas compostos em estados mistos é relevante é aquela em que esses sistemas sejam por sua vez subsistemas de sistemas maiores e emaranhados. Na análise precedente de sistemas compostos bipartidos não há na realidade qualquer restrição sobre a natureza dos subsistemas com seus respectivos espaços de fase quânticos. Dessa forma, é possível considerar, por exemplo, um sistema de três spins $\hat{s}^{(j)}$, $j = 1, 2, 3$ como um sistema bipartido, sendo $\{\hat{s}^{(1)}, \hat{s}^{(2)}\}$ o primeiro e $\{\hat{s}^{(3)}\}$ o segundo subsistema, com espaços de fase de dimensões 4 e 2 respectivamente. Neste caso, um estado puro do sistema de três spins pode levar a um estado misto tanto para o primeiro como para o segundo subsistema, os seus respectivos estados sendo descritos por traços parciais do operador densidade que descreve o sistema composto como um todo. Um problema novo (e difícil!) colocado por esta situação é como caracterizar o emaranhamento dos dois spins $\hat{s}^{(1)}$ e $\hat{s}^{(2)}$ que constituem o primeiro subsistema, estando ele no estado misto que dessa forma lhe corresponde.

Outra situação que leva ao mesmo tipo de problema resulta do fato de que a autonomia e o isolamento que garantem a unitariedade da dinâmica de um sistema quântico qualquer, e em particular de sistemas que possam ser vistos como sistemas quânticos bipartidos, são tipicamente muito difíceis de obter. Uma descrição mais realística deveria portanto sempre levar em conta a influência de um subsistema adicional, que pode ser chamado o ‘ambiente’, do qual é problemático isolar o sistema de interesse e portanto com o qual ele estaria sempre em interação. Como resultado o sistema de interesse deve em geral ser descrito por um estado quântico misto, resultante de um traço parcial tomado sobre o espaço de fase do ‘ambiente’.

Embora as duas situações acima sejam em princípio equivalentes, é à segunda que tem sido reservada a denominação ‘decoerência’, eventualmente tendo em vista a quase-ubiquidade de efeitos de perda de coerência devido a emaranhamento com ‘ambientes’ que seriam, em particular, responsáveis pela filtragem de comportamentos classicamente aceitáveis dentre o repertório muito mais exótico em princípio permitido pela estrutura linear dos espaços de fase quânticos.

4.1 Emaranhamento em estados não puros.

Um estado não puro de um sistema bipartido pode ser caracterizado por um operador densidade $\hat{\rho}$ em $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Neste caso existem vários graus de independência ou interdependência dos dois subsistemas a serem considerados:

- *Fatorabilidade* de $\hat{\rho}$: neste caso o operador densidade é da forma $\hat{\rho} = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2$, onde $\hat{\rho}_{1,2}$ são operadores densidade em $\mathcal{H}_{1,2}$ respectivamente. Neste caso, o estado de cada subsistema é totalmente independente do estado do outro. Valores médios de observáveis do tipo $\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2$ por sua vez fatoram

como produtos de valores médios:

$$\langle \hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2 \rangle \equiv \text{Tr} \left[\left(\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2 \right) (\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2) \right] = \text{Tr}_1 \left[\hat{A}_1 \hat{\rho}_1 \right] \text{Tr}_2 \left[\hat{B}_2 \hat{\rho}_2 \right] = \langle \hat{A}_1 \rangle^{(1)} \langle \hat{B}_2 \rangle^{(2)}.$$

- *Separabilidade* de $\hat{\rho}$: neste caso o operador densidade não é fatorável, mas pode ser escrito sob a forma

$$\hat{\rho} = \sum_j p_j \hat{\rho}_j^{(1)} \otimes \hat{\rho}_j^{(2)} \quad \text{com} \quad p_j > 0, \quad \sum_j p_j = 1 \quad \text{e} \quad \hat{\rho}_j^{(1,2)} \text{ em } \mathcal{H}_{1,2} \text{ respectivamente.} \quad (16)$$

A condição de separabilidade de um operador densidade é mais fraca que a condição de fatorabilidade. Os operadores densidade fatoráveis são também separáveis (com apenas um termo, $p_1 = 1$), mas em geral os operadores separáveis *não* levam a valores médios fatorizáveis. De fato, neste caso

$$\langle \hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2 \rangle \equiv \text{Tr} \left[\left(\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2 \right) \sum_j p_j \left(\hat{\rho}_j^{(1)} \otimes \hat{\rho}_j^{(2)} \right) \right] = \sum_j p_j \langle \hat{A}_1 \rangle_j^{(1)} \langle \hat{B}_2 \rangle_j^{(2)}.$$

Este tipo de não fatorabilidade corresponde à existência de correlações entre os subsistemas, mas que são correlações ao nível de operadores densidade dos subsistemas, e portanto *ao nível de probabilidades*.

Observações: 1) O emaranhamento de estados puros considerado anteriormente corresponde à não fatorabilidade ao nível das *amplitudes* (vetores de estado), e portanto envolve correlações entre os subsistemas também ao nível de amplitudes. Desse modo, estados representados por operadores densidade separáveis (e não fatorizáveis) *não* devem ser considerados (quânticamente) emaranhados. As correlações que eles apresentam, ao nível de probabilidades, são comumente chamadas “correlações clássicas”, o que deve ser entendido como querendo dizer que correlações do mesmo tipo podem também existir em ensembles puramente clássicos.

2) Na definição de separabilidade os operadores densidade $\hat{\rho}_j^{(1)}$ não são sujeitos a quaisquer restrições adicionais às que se aplicam a operadores densidade em geral.

- *Emaranhamento* de $\hat{\rho}$: estados não puros descritos por operadores densidade são emaranhados quando tais operadores *não* são separáveis, isto é, não podem ser representados sob a forma (16). A definição de emaranhamento quântico para estados mistos não apenas é negativa, mas é também não operacional, no sentido de que não há procedimento ou critério geral conhecido que decida sobre a separabilidade ou não separabilidade de um operador densidade geral dado. Note que, para estados puros (representados por operadores densidade idempotentes), um tal critério existe: ele é o posto de Schmidt (número de autovalores diferentes de zero das densidades reduzidas).

- Generalização imediata para sistemas multipartidos:

$$\begin{aligned} \text{Fatorabilidade :} & \quad \hat{\rho}_f = \hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)} \otimes \dots \otimes \hat{\rho}^{(n)}; \\ \text{Separabilidade :} & \quad \hat{\rho}_s = \sum_j p_j \hat{\rho}_j^{(1)} \otimes \hat{\rho}_j^{(2)} \otimes \dots \otimes \hat{\rho}_j^{(n)}, \quad p_j > 0, \quad \sum_j p_j = 1; \\ \text{Emaranhamento :} & \quad \iff \text{ não separabilidade.} \end{aligned}$$

4.2 Condições suficientes de não separabilidade (emaranhamento).

Dado um operador (ou dada uma matriz) densidade que represente um estado misto de um sistema composto bipartido dado, existem vários critérios que podem ser efetivamente aplicados (com maior ou menor trabalho) e que são *suficientes* para afirmar a não separabilidade do estado. Isso não constitui uma solução completa do problema de decisão sobre a separabilidade ou não, porque tais critérios não são em geral *necessários*, o que quer dizer que existem estados que não são separáveis mas que não são detectados pelos critérios suficientes ⁸. Uma forma geral de caracterizar esse tipo de critério é a seguinte[16]:

- São chamados *mapas positivos* aplicações Λ que transformam operadores não negativos de traço finito $\hat{\rho}$ (como são os operadores densidade de estados mistos) em outros operadores $\Lambda(\hat{\rho})$ também não negativos e de traço finito. Mais formalmente: num dado espaço de Hilbert \mathcal{H} ,

$$\begin{aligned} \hat{\rho} : \quad & \text{Tr} [\hat{\rho}] < \infty; \quad \langle \xi | \hat{\rho} | \xi \rangle \geq 0 \text{ para todo } |\xi\rangle \text{ de } \mathcal{H}, \quad \langle \xi | \xi \rangle = 1; \\ & \Downarrow \\ \Lambda(\hat{\rho}) : \quad & \text{Tr} [\Lambda(\hat{\rho})] < \infty; \quad \langle \xi | \Lambda(\hat{\rho}) | \xi \rangle \geq 0 \text{ para todo } |\xi\rangle \text{ de } \mathcal{H}, \quad \langle \xi | \xi \rangle = 1. \end{aligned}$$

- Se Λ_1 é um mapa positivo em \mathcal{H}_1 , a sua extensão trivial $\Lambda_1 \otimes \hat{I}_2$ para $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ em geral *não* é um mapa positivo em \mathcal{H} (isso pode ser demonstrado facilmente por contra-exemplos, v. abaixo). *Mas*, se $\hat{\rho}$ é separável,

$$\hat{\rho} = \sum_j p_j \hat{\rho}_j^{(1)} \otimes \hat{\rho}_j^{(2)} \quad \Rightarrow \quad [\Lambda_1 \otimes \hat{I}_2] (\hat{\rho}) = \sum_j p_j \Lambda_1(\hat{\rho}_j^{(1)}) \otimes \hat{\rho}_j^{(2)}$$

que é um operador não negativo. Portanto se $[\Lambda_1 \otimes \hat{I}_2] (\hat{\rho})$ *não* for um operador não negativo, então $\hat{\rho}$ não é separável (embora se $[\Lambda_1 \otimes \hat{I}_2] (\hat{\rho})$ *sim* for não negativo, não seja possível afirmar que $\hat{\rho}$ seja separável).

- Diferentes mapas positivos fornecem desse modo diferentes critérios suficientes de não separabilidade. O mais simples e muito usado é o operador de transposição \mathcal{T} : se $\{|n\rangle\}$ é uma base em \mathcal{H} ,

$$\hat{\rho} \equiv \{\rho_{nn'}\}, \quad \rho_{nn'} = \langle n | \hat{\rho} | n' \rangle; \quad \mathcal{T}(\hat{\rho}) \equiv \{[\mathcal{T}(\hat{\rho})]_{nn'}\}, \quad [\mathcal{T}(\hat{\rho})]_{nn'} = \langle n | \mathcal{T}(\hat{\rho}) | n' \rangle = \langle n' | \hat{\rho} | n \rangle.$$

O critério correspondente de emaranhamento é a violação da não negatividade de uma das *transposições parciais* $\mathcal{T}_1 \otimes \hat{I}_2$ ou $\hat{I}_1 \otimes \mathcal{T}_2$. Para mostrar que essas transposições parciais não são mapas positivos basta considerar a sua aplicação ao operador densidade associado ao estado de Bell $|B_3\rangle$, o que na base $\{|m_1 m_2\rangle\}$ ordenada como $\{++, +-, -+, --\}$ dá (note que o critério é aplicável *inclusive* a estados mistos, mas não exclusivamente a eles, funcionando também, dentro de suas limitações, para estados puros como é o caso em consideração)

$$\hat{\rho}_{B_3} \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{\mathcal{T}_1 \otimes \hat{I}_2} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

⁸Uma afirmação equivalente a essa é a de que existem critérios que são condições *necessárias* de separabilidade, mas que não são suficientes, isto é, existem estados não separáveis que também satisfazem as mesmas condições. Esta forma da afirmação é mais condizente com a forma pela qual ela é implementada. É claro que a negação de uma condição necessária (mas não suficiente) de separabilidade é uma condição suficiente (mas não necessária) de não separabilidade, ou de emaranhamento quântico.

Os autovalores de $\hat{\rho}_{B_3}$ (que representa um estado puro do sistema de dois spins) são $\{1, 0, 0, 0\}$, consistentemente com a não negatividade e com a idempotência. Por outro lado, os autovalores da transposição parcial acima são $\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}$, o que viola a não negatividade e é suficiente para reconhecer o caráter emaranhado do estado de Bell. Um resultado semelhante decorre da transposição parcial $\hat{1}_1 \otimes \mathcal{T}_2$.

• Outro critério do mesmo tipo é gerado pelo mapa positivo definido por

$$\mathcal{R}(\hat{\rho}) = \text{Tr}[\hat{\rho}]\hat{1} - \hat{\rho}.$$

Neste caso é preciso avaliar a não positividade de uma das extensões

$$\left[\mathcal{R}_1 \otimes \hat{1}_2\right](\hat{\rho}) = (\text{Tr}_1[\hat{\rho}]) \otimes \hat{1}_1 - \hat{\rho} \quad \text{ou} \quad \left[\hat{1}_1 \otimes \mathcal{R}_2\right](\hat{\rho}) = \hat{1}_2 \otimes (\text{Tr}_2[\hat{\rho}]) - \hat{\rho}.$$

Este critério é chamado *critério da redução* porque traz à baila os operadores densidade reduzidos $\hat{\rho}^{(2,1)} = \text{Tr}_{1,2}[\hat{\rho}]$. No caso do exemplo acima (estado de Bell)

$$(\text{Tr}_1[\hat{\rho}_{B_3}]) \otimes \hat{1}_1 - \hat{\rho}_{B_3} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

cujos autovalores são $\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}$, o que novamente viola a não negatividade.

Um exemplo menos trivial: seja o estado misto do sistema de dois spins

$$\hat{\rho}_p \equiv \frac{1-p}{4} \hat{1} + p |B_3\rangle\langle B_3|, \quad 0 < p < 1. \quad (17)$$

ou seja, na base usada anteriormente,

$$\hat{\rho}_p \rightarrow \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1-p & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+p & -2p & 0 \\ 0 & -2p & 1+p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-p \end{pmatrix}.$$

O critério da transposição parcial envolve a matriz

$$\hat{\rho}_p \xrightarrow{\mathcal{T}_1 \otimes \hat{1}_2} \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1-p & 0 & 0 & -2p \\ 0 & 1+p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1+p & 0 \\ -2p & 0 & 0 & 1-p \end{pmatrix}$$

cujos autovalores são $(1+p)/4$ (três vezes) e $(1-3p)/4$. Como $0 < p < 1$ a possível violação da não negatividade vem deste último, e para $p > 1/3$. Portanto, para $1/3 < p < 1$ esse estado misto é emaranhado.

Exercício: Use o critério da redução para estudar o emaranhamento neste último caso.

Embora os critérios acima sejam apenas condições suficientes para decidir sobre a não separabilidade de estados quânticos mistos gerais, para os casos particulares de sistemas de dois spins (ou dois

q-bits) e também para o caso de um subsistema de dois e outro de três níveis (spin 1), eles são na realidade também condições necessárias[17, 18], e portanto resolvem completamente o problema de decisão nesses casos. Isso então significa que o estado misto (17) de fato é um estado *separável* para $p < 1/3$, o que sem dúvida é um resultado muito pouco intuitivo. O que ele significa é que, para $p < 1/3$, *existe* uma representação separável do estado misto que tem *também* a representação (17), sem qualquer implicação sobre o grau de complexidade da representação separável. Além disso, não há algoritmo conhecido que permita determinar alguma representação separável de (17).

4.3 Quantificação do emaranhamento de estados mistos.

No caso de um estado bipartido *puro* qualquer correlação entre subsistemas implica em emaranhamento, pois só pode ocorrer ao nível das amplitudes. As medidas entrópicas citadas acima são basicamente medidas de grau de correlação entre subsistemas, e funcionam portanto como medidas de emaranhamento para estados bipartidos puros. Se, no entanto, o estado global do sistema bipartido é misto, a quantificação do emaranhamento deve ter em conta a necessidade de excluir as correlações chamadas ‘clássicas’, que ocorrem nos estados separáveis ao nível das probabilidades. E as dificuldades em obter critérios operacionais para detectar emaranhamento excluindo correlações ‘clássicas’ (isto é, violações de separabilidade) se reflete em dificuldades também para quantificar a violação da separabilidade.

• Condições gerais que devem ser satisfeitas por uma medida do emaranhamento $M[\hat{\rho}]$ aplicável a sistemas bipartidos mistos:

- a) $M[\hat{\rho}] = 0$ para estados separáveis;
- b) $M[\Lambda(\hat{\rho})] \leq M[\hat{\rho}]$ se Λ é uma operação sobre $\hat{\rho}$ que não é capaz de gerar emaranhamento (isto é, que aplicadas a um estado separável levem a outro estado também separável). Em geral funcionais que satisfazem esta propriedade são ditos monotônicos com relação ao emaranhamento (*entanglement monotonous*).
- c) $M[\hat{\rho}] \leq M[\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)}]$, com $\hat{\rho}^{(1,2)} = \text{Tr}_{2,1}[\hat{\rho}]$ (sub-aditividade).
- d) $M[\lambda\hat{\rho} + (1 - \lambda)\hat{\rho}'] \geq \lambda M[\hat{\rho}] + (1 - \lambda)M[\hat{\rho}']$ para $0 < \lambda < 1$ (concavidade).
- e) $M[\hat{\rho}]$ é aplicável e mantém as propriedades acima também para estados puros.

As entropias utilizadas como medida de emaranhamento para estados puros satisfazem estas propriedades com exceção da propriedade b), pois não distinguem correlações ‘clássicas’ de correlações ao nível das amplitudes. Nos casos de dimensões $2 \otimes 2$ e $2 \otimes 3$, em que a violação da não negatividade pela operação de transposição parcial identifica univocamente o caráter emaranhado ou não do estado misto, uma quantidade que satisfaz todos os requisitos acima[19] é a chamada *negatividade* $\mathcal{N}[\hat{\rho}]$, definida como a soma dos módulos dos autovalores negativos da transposição parcial $\mathcal{T}_1 \otimes \hat{1}_2$ do operador densidade:

$$\mathcal{N}[\hat{\rho}] = \sum_{j, \lambda_j < 0} |\lambda_j|$$

sendo os λ_j os autovalores da transposição parcial de $\hat{\rho}$.

- Cálculo da negatividade para a evolução temporal do emaranhamento em um estado puro (v. fig. 1). Resultados mostrados como função do tempo na fig. 2.
- Cálculo da negatividade para o estado misto do exemplo (17) como função de p . Resultado mostrado na fig. 3. O emaranhamento medido pela negatividade cresce linearmente com p para $p > 1/3$.

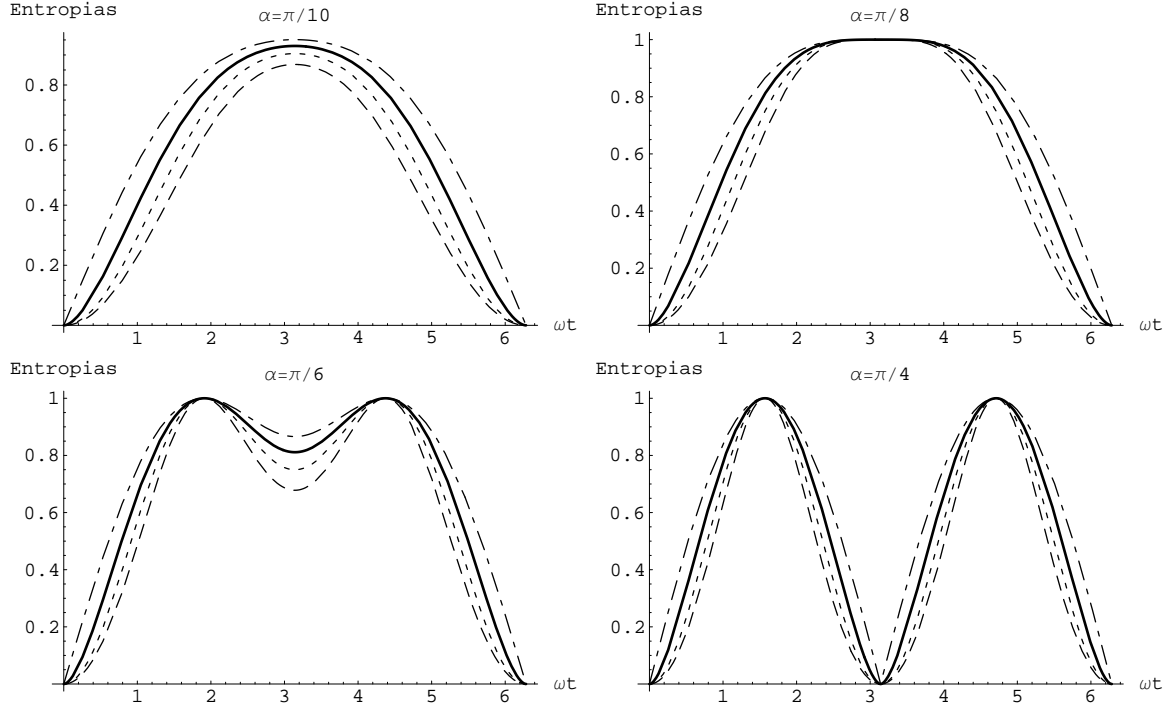


Figura 2: Entropias (como na figura 1) e negatividade (traço-ponto) como funções de ωt para alguns valores do ângulo α (indicados na figura).

• Evolução temporal do emaranhamento (medido pela negatividade) sob a dinâmica unitária correspondente ao hamiltoniano (1), para um estado inicial misto da forma (17). A evolução temporal do operador densidade é fácil de obter notando que a componente do estado inicial proporcional à identidade não evolui no tempo, pois comuta com o operador de evolução $\hat{U}(t) = e^{-\frac{1}{\hbar}\hat{H}t}$. Portanto

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t)\hat{\rho}(0)\hat{U}^\dagger(t) = \frac{1-p}{4}\hat{1} + p\hat{U}(t)|B_3\rangle\langle B_3|\hat{U}^\dagger(t)$$

e o problema se reduz ao de obter a evolução temporal do estado de Bell $|B_3\rangle$. O cálculo da negatividade neste caso é simples pelo fato de que a transposição parcial da matriz densidade leva a uma matriz bloco-diagonal. Desse modo o passo crucial resulta ser simplesmente obter a raiz negativa de uma equação quadrática. Os resultados obtidos para diversos valores de p aparecem na fig. 4.

A notar: o desaparecimento súbito do emaranhamento, que perdura por um intervalo de tempo finito, até o reaparecimento também súbito. Esse anulamento da negatividade indica a *separabilidade* do estado durante esse intervalo de tempo. Trata-se na realidade do mesmo tipo de separabilidade não intuitiva encontrada ao estudar a separabilidade do estado (17) como função de p : a separabilidade se estabelece mesmo restando uma componente finita emaranhada no operador densidade do sistema, indicando que o efeito dessa componente se reduz a correlações ‘clássicas’.

• ‘Purificação’ do estado misto (17): significa escrever um (evidentemente não único) estado *puro* envolvendo um subsistema adicional tal que o traço parcial sobre esse subsistema adicional reproduza o estado misto em questão. Isso pode ser feito facilmente via representação de Schmidt, tratando o operador densidade misto (17) como um operador densidade reduzido. Seus autovalores e respectivos

Figura 3: Negatividade como função do parâmetro p para o estado misto (17).

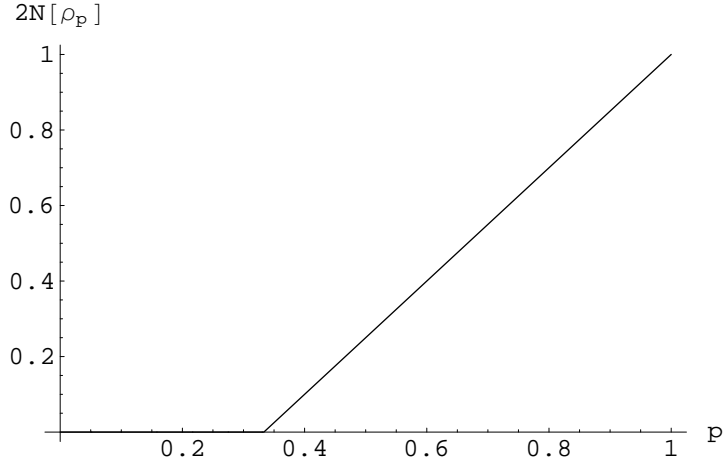
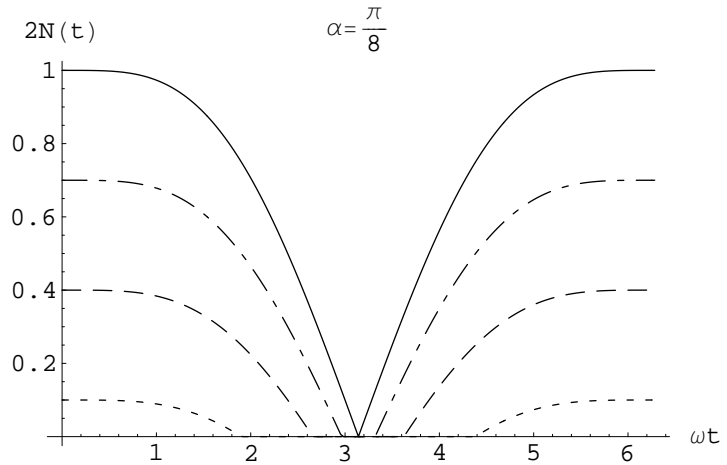


Figura 4: Negatividade ($\times 2$) como função de ωt , para a evolução temporal do estado inicial misto (17) sob ação do hamiltoniano (1) com parâmetros tais que $\alpha = \pi/8$, e para $p = 0.4, 0.6, 0.8$ e 1 (curvas pontilhada, tracejada, traço-ponto e contínua respectivamente). Para $p < 1/3$ a negatividade é nula para todo t .



autovetores são

<u>Autovalor</u>	<u>Autovetor</u>
$\frac{1-p}{4}$	$ \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle$
$\frac{1-p}{4}$	$ \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$
$\frac{1-p}{4}$	$ B_2\rangle$
$\frac{1+3p}{4}$	$ B_3\rangle$

Como há quatro autovetores distintos, a dimensão mínima do espaço de fase do sistema adicional é 4. A decomposição de Schmidt de um estado puro tripartido cujo traço parcial sobre o terceiro subsistema reproduza (17) é portanto

$$|\Psi_p\rangle = \sqrt{\frac{1-p}{4}} \left[|\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \otimes |\phi_1\rangle + |-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle \otimes |\phi_2\rangle + |B_2\rangle \otimes |\phi_3\rangle \right] + \sqrt{\frac{1+3p}{4}} |B_3\rangle \otimes |\phi_4\rangle,$$

onde os $|\phi_j\rangle$, $j = 1, \dots, 4$ são quatro vetores de estado ortonormais (quaisquer!) do sub-sistema adicional.

Primeira aula de exercícios - 24/07/09

Evolução global unitária, início retardado e morte súbita de emaranhamento em estados iniciais mistos e separáveis.

O sistema a ser considerado consiste de dois spins (q-bits) cuja dinâmica é regida pelo hamiltoniano (cf. notas de aula, pag. 8).

$$\hat{H} = \frac{b_1}{\hbar} (\hat{s}_z^{(1)} \otimes \hat{1}_2) + \frac{b_2}{\hbar} (\hat{1}_1 \otimes \hat{s}_z^{(2)}) + \frac{g}{\hbar^2} (\hat{\mathbf{s}}^{(1)} \cdot \hat{\mathbf{s}}^{(2)})$$

cujos estados estacionários são $|\pm \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle$ e

$$|E_+\rangle = \cos \alpha |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle + \sin \alpha |-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \quad \text{e} \quad |E_-\rangle = \sin \alpha |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle - \cos \alpha |-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle.$$

O ângulo α resulta da diagonalização de H na base $\{|m_1 m_2\rangle\}$ e depende dos parâmetros b_1 , b_2 e g (para $b_1 = b_2$ resulta $\alpha = \pi/4$). Os estados são rotulados de forma que $E_+ > E_-$.

1. Tomando como estado inicial o operador densidade puro $\hat{\rho}_p(0) = |-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \langle -\frac{1}{2} \frac{1}{2}|$ e usando o operador de evolução $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ obtenha uma expressão analítica para

$$\hat{\rho}_p(t) = \hat{U}(t) \hat{\rho}_p(0) \hat{U}^\dagger(t)$$

na base $\{|m_1 m_2\rangle\}$ em termos de α e ωt , com $\omega \equiv (E_+ - E_-)/\hbar$. Verifique, em particular, que para $\alpha = \pi/8$ e $\omega t = \pi$

$$\hat{\rho}_p(t = \pi/\omega) = |B_3\rangle \langle B_3|, \quad (\alpha = \frac{\pi}{8}).$$

onde $|B_3\rangle$ é o estado de Bell $(|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle - |-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle) / \sqrt{2}$.

Em seguida obtenha a densidade reduzida $\hat{\rho}_p^{(1)} = \text{Tr}_2[\hat{\rho}_p]$ e a partir dela obtenha a evolução temporal do emaranhamento entre os dois spins conforme medido pela entropia linear, isto é, $1 - \text{Tr} \left[\left(\hat{\rho}_p^{(1)} \right)^2 \right]$.

2. Estude em seguida a evolução temporal de um estado inicial misto e separável dado por

$$\hat{\rho}_s(0) = \frac{1-x}{4} \hat{1} + x |-\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \langle -\frac{1}{2} \frac{1}{2}| \quad \text{com} \quad 0 \leq x \leq 1.$$

Note que para $x = 1$ este operador densidade se reduz ao estado puro tratado no item **1** acima, e que um operador densidade proporcional à unidade não evolui no tempo por comutar com o operador de evolução $\hat{U}(t)$. Obtenha uma expressão analítica para $\hat{\rho}_s(t) = \hat{U}(t) \hat{\rho}_s(0) \hat{U}^\dagger(t)$ em termos de α e ωt .

3. Estude a dinâmica do emaranhamento de $\hat{\rho}_s(t)$ através da negatividade, obtendo uma expressão para essa quantidade em termos de α , ωt e x . **Sugestão:** o cálculo da negatividade neste caso é simplificado pela estrutura particular do operador densidade $\hat{\rho}_s(t)$ que, em termos da base $\{|m_1 m_2\rangle\}$ ordenada como $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$, é dado por uma matriz da forma

$$\hat{\rho}_s(t) = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & d & 0 \\ 0 & d^* & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a \end{pmatrix}$$

cuja transposição parcial é

$$(\mathcal{T}_1 \otimes 1_2) \hat{\rho}_s(t) = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & d^* \\ 0 & b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c & 0 \\ d & 0 & 0 & a \end{pmatrix}.$$

Dessa forma pode haver no máximo um único autovalor negativo o qual, quando existe, é dado por $a - |d|$. A negatividade é portanto dada por $\text{Sup}\{0, |d| - a\}$. Qual a dependência temporal de $|d| - a$ quando essa quantidade é menor que zero?

Verifique então os seguintes fatos: para $\alpha = \pi/8$ e $1/3 < x < 1$ o emaranhamento medido pela negatividade permanece nulo de $t = 0$ a $t = t_1 < \pi/\omega$. A partir desse instante (início retardado do emaranhamento) cresce até atingir um valor máximo \mathcal{N}_{\max} para $\omega t = \pi$ e em seguida decresce simetricamente, voltando a se anular a partir de $t_2 = 2\pi/\omega - t_1$ (morte súbita do emaranhamento). O processo é periódico, com período $2\pi/\omega$, pois mantido pela dinâmica global unitária determinada pelo hamiltoniano H .

Para $\alpha = \pi/8$ e $x = 1$ a solução deste caso se reduz à do item **1**. Compare a evolução temporal do emaranhamento como dado pela negatividade com a versão calculada anteriormente com base na entropia linear.

5. - Sistemas monitorados por um ‘ambiente’.

O fato inevitável de que sistemas quânticos ‘reais’ estão sempre em regime de interação (maior ou menor, mas basicamente inevitável) com um ambiente externo coloca a questão de quais são as consequências dessa interação para as propriedades efetivamente observáveis dos sistemas. Segundo o esquema padrão da MQ, o tratamento do sistema quântico mais seu respectivo ambiente como um sistema autônomo com evolução temporal unitária prevê imediatamente um processo dinâmico que inclui uma dinâmica de emaranhamento do sistema considerado com o ‘ambiente’, com consequências para o que se possa chamar de estado de ambas as partes.

Uma idéia geral interessante é a de que essa interação com o ambiente possa ser vista como um processo de monitoramento *pelo ambiente*, do sistema quântico em consideração. A questão que se torna relevante nesse contexto é quais são as consequências, *para o estado do sistema*, advindas do fato de ele estar sendo continuamente monitorado pelo ambiente. Tal questão é de tratamento difícil por diversas razões.

Em primeiro lugar, o ‘ambiente’ não é em geral algo suficientemente bem definido, além de tipicamente complexo. Por essa razão adquirem relevância *modelos* tratáveis de ambiente, bem como análises que os caracterizem como genericamente adequados em determinadas situações. Particularmente relevante é ainda o fato de que o monitoramento do sistema quântico em consideração se dá através de variáveis dinâmicas que estejam diretamente envolvidas no processo de interação com o ambiente. A natureza das variáveis dinâmicas envolvidas nesse processo é portanto um ingrediente de suma importância para determinar os efeitos do ambiente sobre o estado do sistema quântico considerado. Em segundo lugar, pensando no processo de interação entre sistema e ambiente como um problema de condições iniciais, é preciso observar que o próprio processo de estabelecimento das condições iniciais não pode ser levado a cabo independentemente de interações com o ambiente, sendo razoável pensar que estados iniciais emaranhados sejam na realidade genéricos. As correlações entre subsistemas inerentes a tais estados iniciais são no entanto extremamente difíceis de tratar, com a consequência de que são tipicamente evitadas, sendo usual a hipótese de estados iniciais não apenas separáveis, mas de fato *fatorizáveis*. Finalmente, a dinâmica envolvendo sistema e modelo de ambiente frequentemente precisa ainda ser simplificada para que um tratamento seja suficientemente transparente ou até mesmo possível.

Seguem alguns exemplos que ilustram esses pontos com sistemas de interesse que não são sistemas compostos mas que, como sistemas quânticos, podem sofrer processos de decoerência. A decoerência em sistemas quânticos compostos será tratada na seção 7.

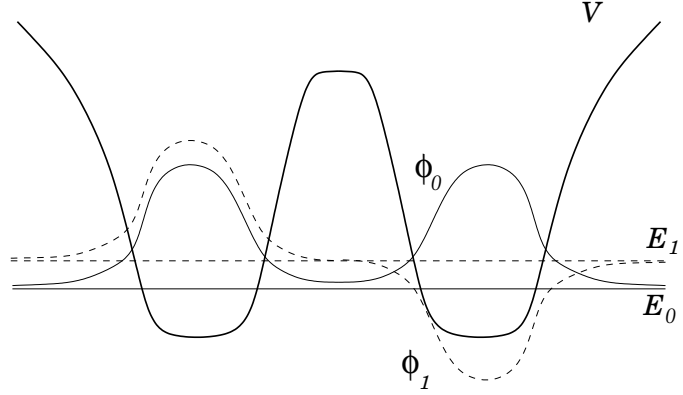
5.1 Monitoramento quântico de um processo de tunelamento[20].

Idéia: o emaranhamento com um sistema externo (que pode ser tão simples quanto um ‘sistema de dois níveis’, ou um spin (qbit)) resultante do acoplamento quântico com tal sistema pode afetar fortemente a evolução temporal de um estado não estacionário de outro sistema quântico. Neste exemplo o sistema assim monitorado externamente está desenvolvendo um processo de tunelamento quântico.

Sistema: partícula em um poço duplo, simétrico em torno de $x = 0$ (unidimensional por simplicidade, barreira de potencial interna permeável), v. fig. 5. O estado fundamental $|\phi_0\rangle$ (simétrico) e o primeiro estado excitado $|\phi_1\rangle$ (anti-simétrico) formam um dubleto ($E_1 - E_0 \ll E_2 - E_1$, etc.).

$$H_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}), \quad H_0|\phi_i\rangle = E_i|\phi_i\rangle, \quad i = 0, 1.$$

Figura 5: Representação esquemática do poço duplo de potencial $V(\hat{q})$ e de seus dois estados estacionários mais baixo (com energias E_0 e E_1), com as respectivas funções de onda ϕ_0 e ϕ_1 .



Estados (não estacionários) fortemente localizados em um dos dois poços:

$$|\phi_{\pm}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|\phi_0\rangle \pm |\phi_1\rangle).$$

Estado inicial e sua evolução livre: definindo, por conveniência, a energia do estado fundamental como zero, $E_0 \equiv 0$

$$|\psi(t=0)\rangle = |\phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\phi_0\rangle + |\phi_1\rangle); \quad |\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\phi_0\rangle + e^{-iE_1t/\hbar}|\phi_1\rangle)$$

Probabilidade de ter decaído (para o estado $|\phi_-\rangle$) depois de um tempo t :

$$|D(t)|^2 \equiv |\langle\phi_-|\psi(t)\rangle|^2 = \text{sen}^2\left(\frac{E_1t}{2\hbar}\right)$$

Taxa de decaimento dD/dt como função de t :

$$\frac{d|D(t)|^2}{dt} = \frac{E_1}{2\hbar} \text{sen}\left(\frac{E_1t}{\hbar}\right)$$

Portanto inicialmente ($t=0$) a taxa de decaimento é zero (o decaimento é devido ao tunelamento da barreira central, e tem um tempo característico dado pela diferença de energia $E_1 - E_0$ dos membros do dubleto). Em qualquer tempo posterior, no entanto ela é diferente de zero (e positiva, para $t < \pi\hbar/(E_1 - E_0)$).

Mecanismo pelo qual a taxa de decaimento deixa de ser zero imediatamente depois de $t > 0$: o estado em $t = t_1$ é

$$|\psi(t_1)\rangle = |\phi_+\rangle C(t_1) + |\phi_-\rangle D(t_1), \quad \left. \begin{array}{l} C(t) \\ D(t) \end{array} \right\} = \frac{1 \pm e^{-eE_1t\hbar}}{2} \quad (18)$$

Evolução temporal por um tempo adicional t' :

$$\begin{aligned} |\psi(t_1+t')\rangle &= e^{-iH_0t'/\hbar}|\phi_+\rangle C(t_1) + e^{-iH_0t'/\hbar}|\phi_-\rangle D(t_1) = \\ &= [|\phi_+\rangle C(t') + |\phi_-\rangle D(t')] C(t_1) + \\ &\quad + (|\phi_+\rangle\langle\phi_+|e^{-iH_0t'/\hbar}|\phi_-\rangle + |\phi_-\rangle\langle\phi_-|e^{-iH_0t'/\hbar}|\phi_-\rangle) D(t_1). \end{aligned}$$

portanto a probabilidade de ter decaído em $t = t_1 + t'$ pode ser escrita como

$$\begin{aligned} |\langle \phi_- | \psi(t_1 + t') \rangle|^2 &= |D(t')|^2 |C(t_1)|^2 + \left| \langle \phi_- | e^{-iH_0 t' / \hbar} | \phi_- \rangle \right|^2 |D(t_1)|^2 + \\ &+ 2 \operatorname{Re} \left[D(t') C(t_1) \langle \phi_- | e^{iH_0 t' / \hbar} | \phi_- \rangle D(t_1)^* \right]. \end{aligned}$$

Os dois primeiros termos são quadráticos em t' (para $t' \rightarrow 0$) e portanto não contribuem para a taxa de decaimento em $t = t_1$. Resulta então que a taxa de decaimento (não nula) em $t = t_1$ provém inteiramente do terceiro termo, que é um termo de interferência entre a amplitude remanescente nesse tempo do estado inicial a amplitude decaída, ortogonal ao estado inicial (v. eq. (18)).

A contribuição do termo de interferência pode porém ser anulada por um processo de emaranhamento. Compondo o sistema descrito acima com um spin inicialmente no estado estacionário $|\frac{1}{2}\rangle$ que não interage em $t < t_1$, o estado do sistema composto nesse intervalo de tempo passará a ser $|\frac{1}{2}\rangle \otimes |\psi(t)\rangle$. Em $t = t_1$ uma interação impulsiva entre o spin e o sistema inverte o estado do spin se o sistema decaiu, e não o altera em caso contrário. Não há interações subsequentes entre o spin e o sistema. Desse modo, para $t > t_1$, o estado do sistema composto é agora um estado emaranhado dado por

$$|\frac{1}{2}\rangle \otimes |\psi_+\rangle C(t) + |-\frac{1}{2}\rangle \otimes |\psi_-\rangle D(t), \quad t > t_1.$$

Repetindo o cálculo da probabilidade de decaimento para $t = t_1 + t'$ com este novo estado e calculando a taxa de decaimento para $t' \rightarrow 0$ obtém-se as mesmas expressões calculadas anteriormente multiplicadas por elementos de matriz de estados do spin. No caso do termo de interferência o fator é $\langle \frac{1}{2} | -\frac{1}{2} \rangle = 0$, de modo que a taxa de decaimento acumulada é zerada pelo processo de emaranhamento⁹. Em tempos subsequentes, e na ausência de qualquer outras intervenção, as duas componentes $|\phi_+\rangle$ e $|\phi_-\rangle$, agora incoerentes devido ao emaranhamento com o spin, evoluirão independentemente com seus respectivos processos de decaimento para os estados também respectivamente ortogonais. As taxas de decaimento acumuladas desses processos podem por sua vez ser zeradas através de novos processos de emaranhamento com spins adicionais, etc.

Esse processo de emaranhamento através do monitoramento externo pelo spin no instante t_1 pode ser descrito em termos de operadores densidade. Para $t < t_1$ o estado do sistema composto que inclui o spin responsável pelo monitoramento é um estado puro fatorizável, de modo que o operador densidade reduzido $\hat{\rho}_0(t)$ do sistema tunelante é o projetor $|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ que pode ser representado por uma matriz densidade idempotente na base $\{|\phi_+\rangle, |\phi_-\rangle\}$ como

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_0(t < t_1) &= [|\phi_+\rangle C(t) + |\phi_-\rangle D(t)] [\langle\phi_+| C^*(t) + \langle\phi_-| D^*(t)] \rightarrow \\ &\rightarrow \begin{pmatrix} |C(t)|^2 & C(t) D^*(t) \\ C^*(t) D(t) & |D(t)|^2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Para $t = t_1 + \epsilon$, porém, e com a dinâmica de acoplamento com o spin tal como descrita, essa matriz densidade perde seus elementos não diagonais nessa base, que se torna portanto parte da base de Schmidt para para o sistema emaranhado resultante do processo de monitoramento:

⁹Esse esquema pode ser visto como um ‘módulo’ cuja iteração continuada dá origem ao chamado “efeito Zenão quântico” [21], proposto num contexto diferente [22] e observado experimentalmente em vários tipos de sistema [23].

$$\hat{\rho}_0(t = t_1 + \epsilon) \rightarrow \begin{pmatrix} |C(t)|^2 & 0 \\ 0 & |D(t)|^2 \end{pmatrix}.$$

A natureza da base de Schmidt pós-monitoramento depende portanto do processo de interação através do qual esse monitoramento se dá. Uma realização explícita simples que leva essencialmente ao resultado descrito é dada pelo termo de interação

$$\hat{H}_{\text{int}} = g(t)|\phi_+\rangle\langle\phi_+| \otimes \hat{\sigma}_x \quad \text{com} \quad \hat{\sigma}_x \equiv \frac{2}{\hbar}\hat{s}_x$$

onde $g(t)$ é uma função impulsiva positiva, diferente de zero apenas em um intervalo de tempo muito curto em torno de $t = t_1$, isto é, essencialmente $g(t) = \hbar\gamma\delta(t - t_1)$. Esse hamiltoniano seleciona a base de Schmidt posterior à interação através de sua dependência explícita do projetor $|\phi_+\rangle\langle\phi_+|$. De fato, por sua natureza impulsiva é possível ignorar outros efeitos dinâmicos durante seu tempo de atuação, cujo efeito é dado pelo operador unitário

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar}|\phi_+\rangle\langle\phi_+| \otimes \hat{\sigma}_x \int_{t_1-\epsilon}^{t_1+\epsilon} g(t) dt} &= e^{-i\gamma|\phi_+\rangle\langle\phi_+| \otimes \hat{\sigma}_x} = \\ &= (|\phi_-\rangle\langle\phi_-| + \cos\gamma|\phi_+\rangle\langle\phi_+|) \otimes \hat{1}_\sigma - i\sin\gamma|\phi_+\rangle\langle\phi_+| \otimes \hat{\sigma}_x. \end{aligned} \quad (19)$$

Para obter esse resultado basta de fato usar a série de potências da exponencial fazendo uso das relações

$$(|\phi_+\rangle\langle\phi_+| \otimes \hat{\sigma}_x)^2 = |\phi_+\rangle\langle\phi_+| \otimes \hat{1}_\sigma \quad \text{e} \quad (|\phi_+\rangle\langle\phi_+| \otimes \hat{\sigma}_x)^3 = |\phi_+\rangle\langle\phi_+| \otimes \hat{\sigma}_x.$$

Escolhendo $\gamma = \pi/2$ a transformação (19) coincide com a que foi suposta anteriormente, a menos de um fator $-i$ no termo que envolve a inversão do spin, e que é irrelevante para o argumento desenvolvido.

Exercício: Verifique que, para valores de γ que não sejam múltiplos ímpares de $\pi/2$, o resultado da evolução impulsiva devida a \hat{H}_{int} leva a um estado emaranhado para o qual as bases de Schmidt não são os estados $|\phi_\pm\rangle$ e $|\pm\rangle$. Determine as bases de Schmidt para um valor genérico de γ .

5.2 Decoerência de um spin por acoplamento a um ambiente de muitos spins.

Um segundo exemplo solúvel, que ilustra a dinâmica de um sistema quântico sujeito a interações permanentes e também quânticas com um ‘ambiente’ externo, é dado pelo hamiltoniano

$$H = \sum_{k=1}^N g_k \hat{\sigma}_z^{(0)} \otimes [\hat{\sigma}_z^{(k)} \otimes \bar{1}_k]$$

onde $\bar{1}_k \equiv \bigotimes_{j \neq k} \hat{1}_j$. Portanto o ‘sistema de interesse’, que é o spin $\hat{\sigma}^{(0)}$, se acopla com constante g_k com o k -ésimo de N spins $\hat{\sigma}^{(j)}$ que constituem o ‘ambiente’ em que ele se encontra. Trata-se de estudar o problema de condições iniciais em que o estado inicial do sistema composto é

$$|\Psi(t=0)\rangle = (\cos\alpha|+\rangle + \sin\alpha|-\rangle)_0 \otimes \bigotimes_{k=1}^N (\cos\beta_k|+\rangle + \sin\beta_k|-\rangle)_k$$

onde os vetores $|\pm\rangle$ são autovetores dos operadores $\hat{\sigma}_z$ com autovalores ± 1 . Desse modo a ação sobre esse estado inicial do operador de evolução completo

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \prod_{k=1}^N e^{\frac{i}{\hbar}g_k\hat{\sigma}_z^{(0)} \otimes [\hat{\sigma}_z^{(k)} \otimes \bar{1}_k]}$$

é imediata, levando ao resultado

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle &= \cos\alpha|+\rangle_0 \bigotimes_{k=1}^N \left[e^{-\frac{i}{\hbar}g_k t} \cos\beta_k|+\rangle + e^{\frac{i}{\hbar}g_k t} \sin\beta_k|-\rangle \right]_k + \\ &+ \sin\alpha|-\rangle_0 \bigotimes_{k=1}^N \left[e^{\frac{i}{\hbar}g_k t} \cos\beta_k|+\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar}g_k t} \sin\beta_k|-\rangle \right]_k = \\ &\equiv \cos\alpha|+\rangle_0 \otimes |R_+(t)\rangle + \sin\alpha|-\rangle_0 \otimes |R_-(t)\rangle. \end{aligned}$$

A matriz densidade reduzida para o sistema de interesse é portanto

$$\rho_0(t) = \begin{pmatrix} \cos^2\alpha \langle R_+(t)|R_+(t)\rangle & \sin\alpha \cos\alpha \langle R_+(t)|R_-(t)\rangle \\ \sin\alpha \cos\alpha \langle R_-(t)|R_+(t)\rangle & \sin^2\alpha \langle R_-(t)|R_-(t)\rangle \end{pmatrix}.$$

Os produtos escalares diagonais $\langle R_{\pm}(t)|R_{\pm}(t)\rangle$ são independentes do tempo e iguais a 1, de modo que os elementos diagonais da matriz densidade na base dos autovetores de $\hat{\sigma}_z^{(0)}$ são também independentes de t e fixados pela condição inicial. Por outro lado

$$\begin{aligned} \langle R_+(t)|R_-(t)\rangle &= \prod_{k=1}^N \left[\cos^2\beta_k e^{2\frac{i}{\hbar}g_k t} + \sin^2\beta_k e^{-2\frac{i}{\hbar}g_k t} \right] = \\ &= \prod_{k=1}^N \left[\cos\frac{2g_k}{\hbar}t + i \cos 2\beta_k \sin\frac{2g_k}{\hbar}t \right] \end{aligned} \quad (20)$$

que claramente recupera a condição inicial fatorizada para $t = 0$ e para $t > 0$ mostra uma evolução temporal multiplamente periódica que envolve frequências $2g_k/\hbar$ e dependente do estado inicial do ‘ambiente’ através dos parâmetros β_k .

A idéia em exemplos deste tipo[26] é evidenciar uma atenuação das correlações, no sistema de interesse, entre componentes associadas à base privilegiada pelo hamiltoniano de interação, que no caso constituída pelos autovetores de $\hat{\sigma}_z^{(0)}$. No caso presente, a amplitude não diagonal (20) é um produto de N amplitudes complexas cujo módulo é “frequentemente” menor que 1, desde que o estado inicial não seja tal que $\beta_k = 0$ ou $\pi/2$, isto é, desde que cada um dos spins que constituem o ‘ambiente’ não estejam em um dos autovetores de $\hat{\sigma}_z^{(k)}$. De fato,

$$\left| \cos\frac{2g_k}{\hbar}t + i \cos 2\beta_k \sin\frac{2g_k}{\hbar}t \right| = \sqrt{1 - \sin^2\frac{2g_k}{\hbar}t \sin^2 2\beta_k},$$

de modo que, para N suficientemente grande e frequências $2g_k/\hbar$ não organizadas de forma perversa (20) tende a ser um número complexo de módulo muito pequeno em quase qualquer instante posterior a um decréscimo inicial transiente.

6. - Efeitos do ambiente sem o ambiente: equações mestras.

A evolução temporal do estado de um dado sistema S , visto como subsistema de um sistema maior, isolado, que inclui o ‘ambiente’ A , além do sistema de interesse, e com o qual ele interage, é fundamentada na hipótese de que a evolução do sistema maior, isolado, é unitária e regida por um hamiltoniano que pode ser pensado como decomposto segundo

$$\hat{H} = \hat{H}_S \otimes \hat{1}_A + \hat{1}_S \otimes \hat{H}_A + \hat{H}_{\text{int}}$$

onde o último termo age não trivialmente em ambos os fatores do espaço produto $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_A$. Desse modo, o estado do sistema de interesse pode em geral ser caracterizado através de um operador densidade reduzido $\hat{\rho}_S(t)$, obtido tomando um traço parcial sobre o ‘ambiente’ do operador densidade $\hat{\rho}(t)$ que descreve o estado do sistema maior, e que evolui unitariamente como prescrito pelo hamiltoniano \mathcal{H} . Uma questão (?) que se pode então colocar é a da obtenção do operador reduzido final diretamente a partir do operador densidade inicial:

$$\begin{array}{ccc} \hat{\rho}(0) & \xrightarrow{\hat{U}(t)} & \hat{\rho}(t) = \hat{U}(t)\hat{\rho}(0)\hat{U}^\dagger(t) \\ \downarrow \text{Tr}_A & & \downarrow \text{Tr}_A \\ \hat{\rho}_S(0) & \xrightarrow{?} & \hat{\rho}_S(t) \end{array}$$

Essa questão obviamente não pode admitir uma resposta geral que seja fechada no subsistema de interesse, pois o resultado da evolução da densidade reduzida em geral depende não só da natureza do ‘ambiente’, mas também de seu acoplamento ao sistema de interesse e do estado inicial *do sistema como um todo*. Sempre que este último não for fatorizável, não haverá uma descrição completa do estado inicial em termos de duas densidades reduzidas, e sempre que ele não for separável não haverá tampouco uma descrição completa em termos de uma soma ponderada de produtos de operadores densidade de S e A . Supondo que o estado inicial seja fatorizável, $\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}_S(0) \otimes \hat{\rho}_A(0)$, é possível no entanto estabelecer uma relação formal interessante entre $\hat{\rho}_S(t)$ e $\hat{\rho}_S(0)$, usando o operador unitário de evolução $\hat{U}(t)$. De fato, usando a decomposição espectral (i.e. em termos de seus autovalores e autovetores) de $\hat{\rho}_A(0)$,

$$\hat{\rho}_A(0) = \sum_n |A_n\rangle p_n \langle A_n|, \quad \text{onde} \quad \hat{\rho}_A(0)|A_n\rangle = p_n|A_n\rangle, \quad \langle A_n|A_{n'}\rangle = \delta_{nn'}, \quad \sum_n |A_n\rangle \langle A_n| = \hat{1}_A,$$

tem-se que

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_S(t) = \text{Tr}_A \left[\hat{U}(t)\hat{\rho}_S(0)\hat{\rho}_A(0)\hat{U}^\dagger(t) \right] &= \sum_{nn'} \langle A_{n'}|\hat{U}(t)|A_n\rangle p_n \hat{\rho}_S(0) \langle A_n|\hat{U}^\dagger(t)|A_{n'}\rangle = \\ &\equiv \sum_{nn'} \hat{W}_{n'n}(t) \hat{\rho}_S(0) \left(\hat{W}_{n'n}(t) \right)^\dagger, \end{aligned} \quad (21)$$

tendo sido definidos os operadores

$$\hat{W}_{n'n}(t) = \langle A_{n'}|\hat{U}(t)|A_n\rangle \sqrt{p_n}.$$

Note que os elementos de matriz envolvendo os estados $|A_n\rangle \in \mathcal{H}_A$ são calculados nesse espaço, sendo que o operador de evolução $\hat{U}(t)$ age sobre vetores do espaço produto $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_A$. Dessa forma os $\hat{W}_{n'n}(t)$ são operadores que agem sobre o espaço de fase do sistema de interesse S . É fácil verificar que, em virtude da unitariedade de $\hat{U}(t)$, $\hat{U}(t)^\dagger \hat{U}(t) = \hat{1}_S \otimes \hat{1}_A$, e da condição de normalização sôbre o traço de $\hat{\rho}_A$, $\sum_n p_n = 1$, eles satisfazem a relação

$$\sum_{nn'} \left(\hat{W}_{n'n}(t) \right)^\dagger \hat{W}_{n'n}(t) = \hat{1}_S. \quad (22)$$

De fato,

$$\sum_{nn'} p_n \langle A_n | \hat{U}^\dagger(t) | A_{n'} \rangle \langle A_{n'} | \hat{U}(t) | A_n \rangle = \sum_n p_n \langle A_n | \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) | A_n \rangle = \sum_n p_n \hat{1}_S \langle A_n | \hat{1}_A | A_n \rangle = \hat{1}_S.$$

A expressão (21) representa a evolução temporal de $\hat{\rho}_S$, integrada de $t = 0$ até o tempo final t , em termos de uma soma envolvendo o conjunto de operadores $\{\hat{W}_{n'n}(t)\}$, com a propriedade (22) e chamados *operadores de Kraus*, que envolvem o operador de evolução completo $\hat{U}(t)$. A efetiva obtenção desses operadores é portanto um problema tão difícil quanto a obtenção de $\hat{U}(t)$.

6.1 Generalidade da expansão em operadores de Kraus e equações mestras[24, 25].

Os operadores envolvidos na expansão (21) foram definidos usando explicitamente a base de autovetores de $\hat{\rho}_A(0)$. No que se refere a um dos índices, essa base é privilegiada pela propriedade de diagonalizar a matriz densidade que descreve o estado do ambiente; mas no que se refere ao índice que corresponde ao traço, a escolha é de fato arbitária, e pode ser alterada através de uma transformação unitária qualquer de \mathcal{H}_A , alterando, também unitariamente, os operadores de Kraus mas sem afetar o resultado no que se refere à transformação do estado do sistema de interesse:

$$\begin{aligned} \{|A_n\rangle\} &\rightarrow \{|a_\nu\rangle\}, \quad |a_\nu\rangle = \sum_{n'} u_{\nu n'} |A_{n'}\rangle; & \sum_{n'} u_{\nu n'} u_{\nu' n'}^* &= \sum_{n'} u_{\nu n'}^* u_{\nu' n'} = \delta_{\nu\nu'}; \\ \{\hat{W}_{n'n}(t)\} &\rightarrow \{\hat{w}_{\nu n}(t)\}, \quad \hat{w}_{\nu n}(t) = \sum_{n'} u_{\nu n'}^* \hat{W}_{n'n}(t); & \hat{\rho}_S(t) &= \sum_{\nu\nu'} \hat{w}_{\nu n}(t) \hat{\rho}_S(0) (\hat{w}_{\nu' n}(t))^\dagger. \end{aligned}$$

Essa transformação linear deve evidentemente preservar as propriedades cruciais do operador densidade reduzido $\hat{\rho}_S$, a saber, hermiticidade, traço igual a um e não negatividade. Transformações \mathcal{T}_S com essas propriedades são importantes por caracterizarem eventuais evoluções *possivelmente não unitárias* de operadores densidade reduzidos, e isso torna relevante a questão inversa: será possível representar dessa forma *qualquer* transformação que preserve essas propriedades?

A resposta a essa questão é afirmativa desde que a positividade (o operador transformado permanece não negativo) seja substituída por uma propriedade mais forte, chamada *positividade completa*: qualquer extensão $\mathcal{T}_S \otimes \mathbf{1}_A$ para um espaço de fase $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_A$ também preserva a não negatividade nesse espaço. Essa restrição exclui, por exemplo, as transformações positivas, mas não completamente positivas, cujas extensões puderam ser utilizadas como condições suficientes de emaranhamento, como a transposição (v. pag. 27). Transformações desse tipo são chamadas ‘mapas dinâmicos’ em [25] e ‘canais quânticos’ em [24] e tipificam o tipo geral de transformação sofrida pelo operador densidade reduzido durante a evolução temporal.

Uma alternativa à expressão da evolução temporal integrada de $\hat{\rho}_S$ é a obtenção de uma expressão diferencial, a partir da evolução determinada por uma soma de operadores durante um intervalo de

tempo infinitesimal dt , que leve a uma equação diferencial para a evolução[24]. De fato, para um mapa dinâmico (ou para um canal quântico) qualquer,

$$\hat{\rho}_S(t+dt) = \sum_j \hat{W}_j(dt) \hat{\rho}_S(t) \left(\hat{W}_j(t) \right)^\dagger \quad \text{com} \quad \sum_j \left(\hat{W}_j(t) \right)^\dagger \hat{W}_j(dt) = \hat{1}_S, \quad (23)$$

onde a rotulação dos operadores de Kraus foi redefinida em termos de um único índice, sem qualquer prejuízo. Por outro lado, o efeito da soma de operadores deve ser tal que

$$\hat{\rho}_S(t+dt) = \hat{\rho}_S(t) + \mathcal{O}(dt)$$

o que pode ser garantido por um operador com a forma geral $\hat{W}_0(dt) = \hat{1}_S - i\hat{h}dt + \hat{k}dt$, onde \hat{h} e \hat{k} são autoadjuntos e de ordem zero em dt (embora possivelmente dependentes de t), e uma coleção de outros operadores $\hat{W}_{j \geq 1}(dt) = \sqrt{dt} \hat{\Gamma}_j$, onde agora $\hat{\Gamma}_j$ não é necessariamente autoadjunto mas é também de ordem zero em dt (e possivelmente dependente de t). Essa parametrização dos operadores de Kraus infinitesimais deve ainda satisfazer a relação (23), que dá

$$\hat{1}_S = \hat{1}_S + 2\hat{k}dt + \sum_{j=1}^{\dots} \hat{\Gamma}_j^\dagger \hat{\Gamma}_j dt + \mathcal{O}(dt^2) \quad \text{donde segue que} \quad \hat{k} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\dots} \hat{\Gamma}_j^\dagger \hat{\Gamma}_j$$

para garantir essa propriedade até ordem dt . Daí resulta finalmente que

$$\frac{\hat{\rho}_S(t+dt) - \hat{\rho}_S(t)}{dt} \rightarrow \frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} = -i[\hat{h}, \hat{\rho}_S(t)] + \sum_{j=1}^{\dots} \left(\hat{\Gamma}_j \hat{\rho}_S(t) \hat{\Gamma}_j^\dagger - \frac{1}{2} \hat{\Gamma}_j^\dagger \hat{\Gamma}_j \hat{\rho}_S(t) - \frac{1}{2} \hat{\rho}_S(t) \hat{\Gamma}_j^\dagger \hat{\Gamma}_j \right). \quad (24)$$

Essa expressão dá a *estrutura* da equação diferencial linear que evolui a densidade reduzida preservando suas propriedades essenciais de traço, hermiticidade e não negatividade, chamada ‘forma de Lindblad’. É claro que neste tipo de dedução há apenas a especificação genérica dos ingredientes (por exemplo, \hat{h} é um operador autoadjunto possivelmente dependente do tempo em \mathcal{H}_S , etc.). No caso possível em que todos os $\hat{\Gamma}_j$ são identicamente nulos, a evolução temporal da densidade reduzida é puramente unitária, o que revela o papel especial desempenhado pelo operador \hat{W}_0 e identifica os $\hat{\Gamma}_j$ como responsáveis por efeitos não unitários na evolução temporal. Qualquer aplicação ou uso dessa equação, no entanto, depende da especificação dos operadores \hat{h} e $\hat{\Gamma}_j$, o que evidentemente deve ser feito caso a caso, sendo tipicamente um problema difícil quando tratado a partir de primeiros princípios. Um dos caminhos para isso consiste em confrontar a forma de Lindblad com aproximações baseadas na expressão microscópica

$$\frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \text{Tr}_A \left[\hat{H}, \hat{\rho}(t) \right]$$

que não é uma equação fechada pois no lado direito $\hat{\rho}(t)$ é o operador densidade completo, em $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_A$, e $\hat{H} = \hat{H}_S \otimes \hat{1}_A + \hat{1}_S \otimes \hat{H}_A + \hat{H}_{\text{int}}$ (v. e.g. ref. [25]). Outra classe de usos desse tipo de ‘equação mestra’ envolve a especificação fenomenológica dos operadores de Kraus. Alguns exemplos simples deste tipo de uso são dados a seguir.

6.2 Exemplos simples do uso da forma de Lindblad.

Os dois exemplos a seguir envolvem como sistema de interesse um oscilador harmônico, cuja dinâmica, quando isolado, é descrita por um hamiltoniano $\hat{H} = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$, que será portanto

sem mais identificado com a parte anti-hermiteana do operador de Kraus $\hat{W}_0(dt)$. Note que essa identificação é em princípio injustificada, pois o gerador da evolução unitária do estado do oscilador poderá em geral incluir também contribuições ligadas à interação entre o oscilador e o ambiente. Ela será no entanto adotada por simplicidade.

Quanto aos demais operadores de Kraus, vamos simplesmente adotar o ponto de vista de que eles representam as ‘pontas de prova’ através das quais o ‘ambiente’ monitora o oscilador. Isso significa que, caso o hamiltoniano microscópico de interação seja dado por

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_j \hat{S}_j \otimes \hat{A}_j$$

onde os \hat{S}_j e os \hat{A}_j são respectivamente operadores em \mathcal{H}_S e \mathcal{H}_A , então eles serão tomados simplesmente como proporcionais aos \hat{S}_j . As constantes de proporcionalidade estarão então ligadas à intensidade dos efeitos dos respectivos termos de interação, o que microscopicamente envolve os operadores \hat{A}_j e o que se possa chamar o estado do ambiente.

A) Monitoramento da energia do oscilador pelo ambiente. Neste caso há um único operador $\hat{\Gamma}_1 = \sqrt{\gamma} a^\dagger a$ a ser acrescentado, que é em particular um operador hermiteano, e a equação mestra resultante é

$$\frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} = -i[\omega a^\dagger a, \hat{\rho}_S(t)] + \gamma \left[a^\dagger a \hat{\rho}_S(t) a^\dagger a - \frac{1}{2} (a^\dagger a)^2 \hat{\rho}_S(t) - \frac{1}{2} \hat{\rho}_S(t) (a^\dagger a)^2 \right].$$

Passando para a representação de interação que dá conta da parte unitária da evolução, i.e.

$$a \rightarrow \mathbf{a} = e^{i\omega t a^\dagger a} a e^{-i\omega t a^\dagger a} = a e^{-i\omega t} \quad \hat{\rho}_S(t) \rightarrow \tilde{\rho}_S(t) = e^{i\omega t a^\dagger a} \hat{\rho}_S(t) e^{-i\omega t a^\dagger a}$$

resulta, como $\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} = a^\dagger a$,

$$\frac{d\tilde{\rho}_S(t)}{dt} = \gamma \left[a^\dagger a \tilde{\rho}_S(t) a^\dagger a - \frac{1}{2} (a^\dagger a)^2 \tilde{\rho}_S(t) - \frac{1}{2} \tilde{\rho}_S(t) (a^\dagger a)^2 \right].$$

Essa equação é facilmente resolvida na base dos autovetores $|n\rangle$ de $a^\dagger a$. Pondo

$$\tilde{\rho}_S(t) = \sum_{nn'} |n\rangle r_{nn'}(t) \langle n'| \quad \text{com} \quad a^\dagger a |n\rangle = n |n\rangle$$

resulta que

$$\dot{r}_{nn'} = \gamma \left[nn' - \frac{1}{2} n^2 - \frac{1}{2} n'^2 \right] r_{nn'} = -\frac{\gamma}{2} (n - n')^2 r_{nn'} \quad \text{donde} \quad r_{nn'}(t) = r_{nn'}(0) e^{-\frac{\gamma}{2} (n - n')^2 t}$$

sendo $\sum_{nn'} |n\rangle r_{nn'}(0) \langle n'|$ a condição inicial para $\tilde{\rho}_S$. A volta à representação de Schrödinger apenas acrescenta fases dependentes do tempo e de n, n' aos elementos de matriz $r_{nn'}(t)$.

Portanto a dinâmica de Lindblad, com as escolhas feitas neste caso para os seus ingredientes, tem por efeito atenuar exponencialmente, e numa escala de tempo determinada pelo fator γ , os elementos não diagonais da matriz densidade *quando expressa na base dos autovetores da energia*. Portanto essa particular base desempenha um papel especial *para os efeitos não unitários* da dinâmica, o que pode ser claramente atribuído ao fato de que o operador de Kraus \hat{W}_1 é diagonal nessa base. Essa característica, segundo a qual o monitoramento pelo ambiente degrada no sistema de interesse

as coerências quânticas eventualmente pre-existentes na representação que diagonaliza os operadores através dos quais ele é monitorado pelo ambiente é um dos pontos centrais do chamado ‘programa de decoerência’ para entender ‘a emergência de características clássicas’ em um mundo puramente quântico[25, 26, 27].

Note que, neste caso, o valor médio $\langle a^\dagger a \rangle_t = \text{Tr} [a^\dagger a \hat{\rho}_S(t)]$ é independente do tempo, isto é, o valor médio da energia é evidentemente conservado qualquer que seja o estado inicial, pois ele depende apenas dos elementos de matriz de $\hat{\rho}_S(t)$ que são diagonais na base $\{|n\rangle\}$, os quais resultam independentes do tempo. O processo de decoerência ocorre portanto sem dissipação de energia.

B) Monitoramento da ‘amplitude’ pelo ambiente. Neste caso $\hat{\Gamma}_1 = \sqrt{\gamma} a$, um operador não hermiteano. A razão da referência à amplitude com relação a esta escolha vem do fato de que esse operador tem como autovetores os estados coerentes $|v\rangle$ do oscilador, cujos correspondentes autovalores v têm o papel de amplitudes complexas de pacotes de onda normalizados de incerteza mínima:

$$\left. \begin{array}{l} a|v\rangle = v|v\rangle \\ \langle v|a^\dagger = \langle v|v^* \end{array} \right\}, \quad |v\rangle = e^{-\frac{|v|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{v^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad \langle v|v\rangle = 1.$$

Um estado coerente, como superposição de diferentes autovetores de $a^\dagger a$, é obviamente não estacionário. Sua energia média, em unidades de $\hbar\omega$, é $\langle v|a^\dagger a|v\rangle = |v|^2$, e a dispersão quadrática média σ é poissoniana:

$$\sigma = \sqrt{\langle v|(a^\dagger a)^2|v\rangle - (\langle v|a^\dagger a|v\rangle)^2} = \sqrt{|v|^2(|v|^2 + 1) - |v|^4} = |v| \quad \text{i. e.} \quad \frac{\sigma}{\langle a^\dagger a \rangle} = \frac{1}{|v|}.$$

A equação mestra neste caso é

$$\frac{d\hat{\rho}_S(t)}{dt} = -i[\omega a^\dagger a, \hat{\rho}_S(t)] + \gamma \left[a\hat{\rho}_S(t)a^\dagger - \frac{1}{2}a^\dagger a\hat{\rho}_S(t) - \frac{1}{2}\hat{\rho}_S(t)a^\dagger a \right] \quad (25)$$

ou, na representação de interação,

$$\frac{d\tilde{\rho}_S(t)}{dt} = \gamma \left[a\tilde{\rho}_S(t)a^\dagger - \frac{1}{2}a^\dagger a\tilde{\rho}_S(t) - \frac{1}{2}\tilde{\rho}_S(t)a^\dagger a \right] \quad (26)$$

pois novamente é possível substituir os operadores da representação de interação a, a^\dagger por a, a^\dagger devido ao cancelamento das fases adicionais em todos os termos.

A energia média do oscilador não é aqui conservada. De fato

$$\langle a^\dagger a \rangle_t = \text{Tr} [a^\dagger a \hat{\rho}_S(t)] = \text{Tr} [a^\dagger a \tilde{\rho}_S(t)],$$

pois

$$\text{Tr} [a^\dagger a \tilde{\rho}_S(t)] = \text{Tr} [a^\dagger a e^{ia^\dagger a \omega t} \hat{\rho}_S(t) e^{-ia^\dagger a \omega t}] = \text{Tr} [e^{-ia^\dagger a \omega t} a^\dagger a e^{ia^\dagger a \omega t} \hat{\rho}_S(t)] = \text{Tr} [a^\dagger a \hat{\rho}_S(t)],$$

onde foi usada a invariança cíclica do traço e a comutatividade da evolução unitária do oscilador com o operador $a^\dagger a$. Desse modo, usando novamente a propriedade cíclica do traço,

$$\begin{aligned} \frac{d\langle a^\dagger a \rangle_t}{dt} &= \gamma \text{Tr} \left[a^\dagger a a \tilde{\rho}_S(t) a^\dagger - \frac{1}{2} (a^\dagger a)^2 \tilde{\rho}_S(t) - \frac{1}{2} a^\dagger a \tilde{\rho}_S(t) a^\dagger a \right] = \\ &= \gamma \text{Tr} [a^\dagger a^\dagger a a \tilde{\rho}_S(t) - a^\dagger a a^\dagger a \tilde{\rho}_S(t)] = -\gamma \langle a^\dagger a \rangle_t. \end{aligned}$$

Portanto, qualquer que seja o estado inicial $\hat{\rho}_S(0)$, a energia média decai exponencialmente com tempo característico γ^{-1} ,

$$\langle E \rangle_t = \langle E \rangle_0 e^{-\gamma t},$$

e a evolução temporal descrita por (25) corresponde fenomenologicamente, nesse aspecto, a um oscilador (quântico) amortecido. O fato de que não há qualquer efeito do amortecimento (associado ao parâmetro γ) sobre a frequência do oscilador resulta simplesmente de o operador hermiteano \hat{h} , ter sido identificado ingenuamente com o hamiltoniano do oscilador isolado. Outras escolhas (podendo até incluir dependências do tempo) são evidentemente possíveis, dentro das condições gerais sob as quais a equação de Lindblad foi estabelecida, e de fato resultam de tratamentos aproximados com base microscópica[25].

É fácil também obter uma solução da equação (26) para uma condição inicial coerente, isto é, $\tilde{\rho}_S(0) = |v_0\rangle\langle v_0|$. De fato, é fácil verificar neste caso que a solução permanece em qualquer tempo um estado coerente com uma dependência temporal apropriada para o parâmetro v . Na representação de interação,

$$\tilde{\rho}_S(t) = |\tilde{v}(t)\rangle\langle\tilde{v}(t)|, \quad \text{com} \quad \tilde{v}(t) = v_0 e^{-\frac{\gamma}{2}t}.$$

Uma soma de estados coerentes distintos, por outro lado, sofre decoerência. Tomando como condição inicial

$$\tilde{\rho}_S(0) = N (|v_1\rangle + |v_2\rangle) (\langle v_1| + \langle v_2|) = N (|v_1\rangle\langle v_1| + |v_2\rangle\langle v_2| + |v_1\rangle\langle v_2| + |v_2\rangle\langle v_1|),$$

onde $N = (2 + \langle v_i|v_2\rangle + \langle v_2|v_1\rangle)^{-1/2}$ é a constante de normalização, e invocando a linearidade da equação (26), os dois primeiros termos devem permanecer como estados coerentes em qualquer tempo como no caso já tratado, isto é

$$|v_j\rangle\langle v_j| \longrightarrow |\tilde{v}_j(t)\rangle\langle\tilde{v}_j(t)| \quad \text{com} \quad \tilde{v}_j(t) = v_j e^{-\frac{\gamma}{2}t}, \quad j = 1, 2.$$

Os dois termos restantes da condição inicial podem ser tratados por meio do ansatz

$$|v_1\rangle\langle v_2| + |v_2\rangle\langle v_1| \longrightarrow |\tilde{v}_1(t)\rangle \alpha(t) \langle\tilde{v}_2(t)| + \text{c.c.} \quad \text{com} \quad \alpha(0) = 1$$

onde $\alpha(t)$ é um coeficiente complexo a ser determinado de forma a satisfazer a equação. O resultado é[25]

$$\alpha(t) = \exp \left[\left(-\frac{1}{2} |v_1 - v_2|^2 + i \text{Im} (v_1 v_2^*) \right) (1 - e^{-\gamma t}) \right]$$

que, para tempos curtos na escala da dissipação de energia, isto é, $t \ll 1/\gamma$, leva a

$$|\alpha(t)| \simeq e^{-\frac{\gamma}{2} |v_1 - v_2|^2 t}$$

que, para $|v_1 - v_2|^2 \gg 1$ (por exemplo, amplitudes ‘macroscopicamente diferentes’), leva a uma supressão exponencial da coerência entre os dois estados coerentes que é extremamente rápida na escala da dissipação de energia.

Exercício: Verifique explicitamente as soluções apresentadas acima da equação (26), para um estado coerente e para a superposição de dois estados coerentes respectivamente. **Sugestão:** verifique e eventualmente use as relações: $a^\dagger|v\rangle = \left(\frac{d}{dv} + \frac{v^*}{2}\right)|v\rangle$, $\langle v|a = \left(\frac{d}{dv^*} + \frac{v}{2}\right)\langle v|$, $\frac{d}{dt}|v(t)\rangle = \frac{dv}{dt}\frac{d}{dv}|v\rangle$, $\frac{d}{dt}\langle v(t)| = \frac{dv^*}{dt}\frac{d}{dv^*}\langle v(t)|$.

7. - ‘Morte súbita’ do emaranhamento devida a monitoramento externo.

A dinâmica do emaranhamento em um sistema *composto* monitorado por um ambiente revela um aspecto particular que tem chamado alguma atenção, tanto por sua natureza ‘não intuitiva’ como por uma sugerida elevação de tom da ameaça representada por processos de decoerência para eventuais usos do emaranhamento. Esse aspecto é conhecido como ‘morte súbita do emaranhamento’ (‘Entanglement Sudden Death’, ESD, sigla também interpretada, supostamente de forma mais circunspecta, como ‘Early-Stage Disentanglement’, talvez ‘desemaranhamento precoce’). Há uma revisão muito recente sobre essa questão[28].

O que segue é uma exegese algo sumária de um exemplo desse tipo de comportamento, associado a uma realização experimental, levada a efeito também recentemente (publicada em 2007) pelo grupo da UFRJ[29]. Ela serve também como preparação para outro exemplo[30], que envolve uma dinâmica fechada que é completamente solúvel em termos analíticos muito simples, que será tratado na segunda aula de exercícios.

7.1 Decaimento e decoerência de um sistema de dois níveis em um ambiente frio.

O sistema de dois níveis, representados por dois vetores de base ortonormais $|e\rangle_S$ (‘excitado’) e $|f\rangle_S$ (‘fundamental’) está dinamicamente acoplado a um ambiente que consiste em um ‘reservatório’ inicialmente vazio (‘temperatura zero’), representado nessa situação por um estado de ‘vácuo’ $|0\rangle_R$. O estado do sistema mais ambiente representado por $|e\rangle_S \otimes |0\rangle_R$ decai para o estado $|f\rangle_S \otimes |1\rangle_R$, em que $|i\rangle_R$ é um estado do reservatório que contém um quantum emitido pelo sistema de dois níveis ao decair. A probabilidade de que o decaimento tenha ocorrido depois de um tempo t é $p(t)$, $p(0) = 0$ e $p(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 1$. Devido à natureza do reservatório, o quantum emitido não retorna ao sistema de dois níveis, sendo $p(t)$ tomado fenomenologicamente como sendo do tipo $1 - e^{-\Gamma t}$, embora isto não seja necessário ao argumento e sequer à realização experimental implementada. Por outro lado, o estado do sistema mais ambiente representado por $|f\rangle_S \otimes |0\rangle_R$ não evolui no tempo e é na realidade o estado fundamental estacionário do sistema composto.

Essa dinâmica fenomenológica pode ser expressa em termos de amplitudes, de forma que a evolução temporal de um estado inicial puro e fatorizável, dado como o produto de um estado geral do sistema de dois níveis com o estado $|0\rangle_R$, seja tomada como sendo

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &\equiv \left(a|e\rangle_S + \sqrt{1 - |a|^2}|f\rangle_S \right) \otimes |0\rangle_R \\ \downarrow t & \\ |\psi(t)\rangle &= a\sqrt{1 - p(t)}|e\rangle_S \otimes |0\rangle_R + a\sqrt{p(t)}|f\rangle_S \otimes |1\rangle_R + \sqrt{1 - |a|^2}|f\rangle_S \otimes |0\rangle_R. \end{aligned} \quad (27)$$

O estado resultante no tempo t permanece um estado puro do sistema composto pelo sistema de dois níveis mais o ambiente frio, embora um estado em que esses dois subsistemas estão emaranhados.

Uma medida do emaranhamento entre eles pode ser obtida através da densidade reduzida do sistema de dois níveis (por exemplo), que é dada por

$$\hat{\rho}^{(S)}(t) = \text{Tr}_R [|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|] = \begin{pmatrix} |a|^2(1-p(t)) & a\sqrt{(1-|a|^2)(1-p(t))} \\ a^*\sqrt{(1-|a|^2)(1-p(t))} & 1-|a|^2(1-p(t)) \end{pmatrix}, \quad (28)$$

onde o resultado foi escrito em termos da base $\{|e\rangle, |g\rangle\}$. A partir dessa matriz, a entropia linear $S_1 = 1 - \text{Tr} \left[\left(\hat{\rho}^{(S)} \right)^2 \right]$ pode ser facilmente obtida como $S_1 = 2|a|^4 p(1-p)$. O emaranhamento entre os dois subsistemas medido desse modo passa portanto pelo valor máximo $|a|^2/2$ quando $p(t) = 1/2$.

A evolução da densidade reduzida do sistema de dois níveis sob a dinâmica fenomenológica global (27), cujo resultado é dado pela eq. (28), pode ser expressa em termos de operadores de Kraus, que podem ser facilmente identificados como sendo (cf. ref. [29])

$$\hat{W}_1(t) = \begin{pmatrix} \sqrt{1-p(t)} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{W}_2(t) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sqrt{p(t)} & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{W}_1^\dagger(t)\hat{W}_1(t) + \hat{W}_2^\dagger(t)\hat{W}_2(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

isto é, com essas definições,

$$\hat{\rho}^{(1)}(t) = \sum_{j=1}^2 \hat{W}_j(t)\hat{\rho}^{(1)}(0)\hat{W}_j^\dagger(t).$$

No entanto é preciso notar que a dinâmica de amplitudes tal como escrita em (27) *não é* uma dinâmica hamiltoniana do tipo usual para sistemas isolados, o que pode ser visto facilmente buscando o gerador da evolução temporal. Isso pode ser feito calculando $i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}$ e tratando de escrever o resultado como $\hat{H}|\psi(t)\rangle$.

7.2 Decaimento e decoerência de dois sistemas de dois níveis em um ambiente frio.

A dinâmica (27) pode ser aplicada a um par de sistemas de dois níveis, que serão tomados como estando inicialmente no estado

$$|\Psi(0)\rangle = [\alpha|gg\rangle_S + \beta e^{i\delta}|ee\rangle_S] \otimes |00\rangle_R,$$

onde $|gg\rangle_S \equiv |g\rangle_{S_1} \otimes |g\rangle_{S_2}$, e uma convenção semelhante para $|ee\rangle_S$. As amplitudes α e β são reais e positivas, e satisfazem $\alpha^2 + \beta^2 = 1$. O estado do reservatório foi escrito como $|00\rangle_R \equiv |0\rangle_{R_1} \otimes |0\rangle_{R_2}$ para enfatizar a hipótese de que cada um dos sistemas de dois níveis decai excitando reservatórios independentes. Desse modo resulta que

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= [\alpha|gg\rangle_S + \beta e^{i\delta}(1-p(t))|ee\rangle_S] \otimes |00\rangle_R + \\ &+ \beta e^{i\delta} \sqrt{p(t)(1-p(t))} (|eg\rangle_S \otimes |01\rangle_R + |ge\rangle_S \otimes |10\rangle_R) + \\ &+ \beta e^{i\delta} p(t) |gg\rangle_S \otimes |11\rangle_R. \end{aligned} \quad (29)$$

Esse estado é novamente um estado puro do sistema composto. A matriz densidade reduzida para o par de sistemas de dois níveis se obtém facilmente (na base $\{|gg\rangle_S, |ge\rangle_S, |eg\rangle_S, |ee\rangle_S\}$) como

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}^{(S)}(t) &= \text{Tr}_R [|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|] = \\
&= \begin{pmatrix} \alpha^2 + \beta^2 p^2(t) & 0 & 0 & \alpha\beta e^{-i\delta}(1-p(t)) \\ 0 & \beta^2 p(t)(1-p(t)) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta^2 p(t)(1-p(t)) & 0 \\ \alpha\beta e^{i\delta}(1-p(t)) & 0 & 0 & \beta^2(1-p(t))^2 \end{pmatrix}. \quad (30)
\end{aligned}$$

O emaranhamento, no tempo t , entre o par de sistemas de dois n veis e o ‘ambiente’ representado pelos reservat rios independentes pode ser medido pela entropia linear (v. fig. 6 (a))

$$S_1 = \text{Tr}_S \left[\left(\hat{\rho}^{(S)}(t) \right)^2 \right] = 4\beta^2 p(t)(1-p(t)) \left[1 - \beta^2 p(t)(1-p(t)) \right].$$

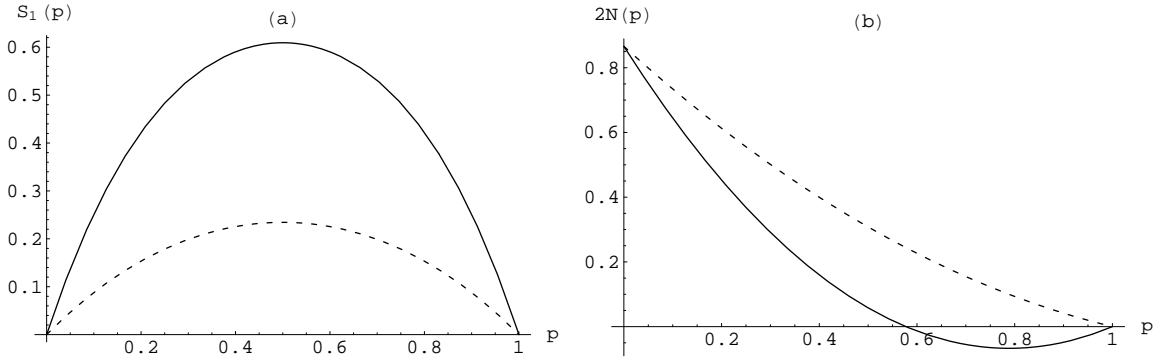


Figura 6: (a) - Entropia linear S_1 do subsistema constitu do pelo par de sistemas de dois n veis no estado $|\Psi(t)\rangle$ (eq. (29)), como fun o da probabilidade de decaimento $p(t)$, para $\beta = \sqrt{3}/2$ (linha cheia) e $\beta = 1/2$ (linha pontilhada). (b) - Negatividade ($\times 2$) como fun o de $p(t)$ para os mesmos casos de (a) e com as mesmas conven es. O desemaranhamento precoce ocorre no caso $\beta = \sqrt{3}/2$, $\alpha = 1/2$. N o h  depend ncia com a fase δ nestas quantidades.

O aspecto de maior interesse neste exemplo  , no entanto, a din mica do emaranhamento interno do par de sistemas de dois n veis. Como o estado desse substsistema   em geral misto, o emaranhamento entre S_1 e S_2 pode ser medido pela negatividade¹⁰, calculada atrav s da transposi o parcial da densidade reduzida $\hat{\rho}^{(S)}(t)$. Ela corresponde ao  nico autovalor negativo (quando houver) da matriz

$$\begin{pmatrix} \alpha^2 + \beta^2 p^2(t) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta^2 p(t)(1-p(t)) & \alpha\beta e^{i\delta}(1-p(t)) & 0 \\ 0 & \alpha\beta e^{-i\delta}(1-p(t)) & \beta^2 p(t)(1-p(t)) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta^2(1-p(t))^2 \end{pmatrix}, \quad (31)$$

o qual na realidade s  pode provir dos autovalores da submatriz 2×2 situada nas duas linhas e colunas centrais dessa matriz. Estes s o facilmente obtidos como $\lambda_{\pm} = \beta(1-p)(\beta p \pm \alpha)$, de modo que a negatividade   (v. fig. 6 (b))

¹⁰Em [29] o emaranhamento do subsistema misto constitu do pelos dois sistemas de dois n veis n o   medido atrav s da negatividade, mas sim atrav s da chamada *concorr ncia* (v. ref. [16]). Para este caso particular, no entanto, resulta que essas duas medidas podem ser obtidas analiticamente, e com resultados id nticos.

$$\mathcal{N}(\hat{\rho}^{(S)}(t)) = \sum_{j, \lambda_j < 0} |\lambda_j| = \max\{0, -\lambda_-\} = \max\{0, \beta(1-p(t))(\alpha - \beta p(t))\}.$$

Lembrando que $p(0) = 0 \leq p(t) < 1 = p(t \rightarrow \infty)$, essa expressão mostra que, quando $\beta > \alpha$, o fator $(\alpha - \beta p(t))$ se anula para $p(t) = \alpha/\beta$, o que ocorre para um valor *finito* de t , embora o processo de decaimento leve ao estado $|gg\rangle$ apenas assintoticamente. Trata-se, portanto, de um exemplo de desemaranhamento precoce. Note que, uma vez estabelecida, a separabilidade do estado do par de sistemas de dois níveis se mantém até $t \rightarrow \infty$.

O efeito da hipótese de reservatórios independentes, tal como interpretada acima, é o anulamento de termos não diagonais entre componentes $|eg\rangle$ e $|ge\rangle$ na matriz densidade reduzida (30), o que por sua vez leva ao anulamento de elementos de matriz não diagonais da submatriz 2×2 situada nas linhas e colunas externas da transposição parcial (31). Isso, de fato resulta da suposta ortogonalidade dos estados correspondentes $|01\rangle$ e $|10\rangle$ do ‘ambiente’.

Uma forma de relaxar essa hipótese consiste em supor que o decaimento de apenas um, mas de um qualquer, dos dois sistemas de dois níveis leva a um mesmo estado do ‘ambiente’, que pode ser escrito simplesmente como $|1\rangle$. Concomitantemente, os estados $|ee\rangle$ e $|gg\rangle$ são associados a estados $|0\rangle$ e $|2\rangle$ do ‘ambiente’, respectivamente. Nesse caso, a matriz (30) ganha termos de correlação adicionais $\beta^2 p(1-p)$ entre os vetores de base $|eg\rangle$ e $|ge\rangle$, que sob transposição parcial aparecem como elementos de matriz não diagonais da submatriz constituída pelas colunas e linhas externas:

$$\begin{pmatrix} \alpha^2 + \beta^2 p^2(t) & 0 & 0 & \beta^2 p(t)(1-p(t)) \\ 0 & \beta^2 p(t)(1-p(t)) & \alpha\beta e^{i\delta}(1-p(t)) & 0 \\ 0 & \alpha\beta e^{-i\delta}(1-p(t)) & \beta^2 p(t)(1-p(t)) & 0 \\ \beta^2 p(t)(1-p(t)) & 0 & 0 & \beta^2(1-p(t))^2 \end{pmatrix}.$$

Como pode ser notado, a submatriz interna, de onde provém o eventual autovalor negativo no caso de reservatórios independentes, não é alterada por essa re-interpretação do ‘ambiente’. Por outro lado, os autovalores da nova submatriz externa são ambos não negativos, de modo que a negatividade como função de p é a mesma nos dois casos.

7.3 Sobre a realização experimental em [29].

Em [29] os sistemas de dois níveis são realizados ‘de uma forma puramente óptica’ em termos dos estados de polarização de fótons. Mais especificamente, $|e\rangle \rightarrow |V\rangle$ e $|g\rangle \rightarrow |H\rangle$ onde $|V\rangle$ e $|H\rangle$ são estados (ortogonais) de polarização ‘vertical’ e ‘horizontal’ respectivamente. O decaimento de $|e\rangle$ é dessa forma realizado através de uma rotação da polarização, que converte $|V\rangle$ em uma combinação linear de $|V\rangle$ e $|H\rangle$:

$$|V\rangle \xrightarrow{t} \cos 2\theta |V\rangle + \sin 2\theta |H\rangle$$

de modo que $\sqrt{p} \leftrightarrow \sin 2\theta$ e $\sqrt{1-p} \leftrightarrow \cos 2\theta$ e a dependência temporal se torna na realidade inteiramente fictícia, diferentes ‘tempos de decaimento’ sendo simulados por diferentes valores (fixos) adotados para θ .

O emaranhamento com o ‘reservatório’, por outro lado, é realizado através da geometria de um arranjo óptico que separa espacialmente a componente de polarização vertical incidente da componente de polarização horizontal adquirida através da rotação aplicada à polarização durante o trajeto.

Segunda aula de exercícios - 30/07/09

Evolução global unitária, morte súbita do emaranhamento entre dois qubits não interagentes, sob interação externa com um deles.

O sistema a ser considerado consiste de dois spins (q-bits) não interagentes entre si, um dos quais porém interage com um modo harmônico externo A com hamiltoniano $\hbar\omega a^\dagger a$. A dinâmica é regida pelo hamiltoniano¹¹

$$\hat{H} = \frac{\epsilon}{\hbar} \left(\hat{s}_z^{(1)} \otimes \hat{I}_2 + \hat{I}_1 \otimes \hat{s}_z^{(2)} \right) + \hbar\omega a^\dagger a + \frac{g}{\hbar} \left(a^\dagger \hat{s}_-^{(2)} + a \hat{s}_+^{(2)} \right)$$

e o estado inicial é

$$|t=0\rangle = \left(\cos\alpha \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + \sin\alpha \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \right) \otimes |n\rangle \quad (32)$$

onde $a^\dagger a |n\rangle = n |n\rangle$, um estado estacionário do modo harmônico de frequência ω . Por simplicidade vamos supor que $\epsilon = \hbar\omega$ (caso ‘ressonante’).

1. Este problema de condições iniciais é solúvel analiticamente pelo fato de que os efeitos do termo de interação (último termo do hamiltoniano) se reduzem às transições

$$\left| \frac{1}{2} \right\rangle \otimes |n\rangle \leftrightarrow \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \otimes |n+1\rangle \quad \text{e} \quad \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \otimes |n\rangle \leftrightarrow \left| \frac{1}{2} \right\rangle \otimes |n-1\rangle$$

de modo que o estado evoluído a partir da condição inicial (32) pode em qualquer tempo ser escrito como uma combinação linear de apenas quatro estados, $\left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \otimes |n\rangle$, $\left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \otimes |n\rangle$, $\left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \otimes |n+1\rangle$ e $\left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \otimes |n-1\rangle$:

$$|t\rangle = x_1(t) \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \otimes |n\rangle + x_2(t) \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \otimes |n\rangle + x_3(t) \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \otimes |n+1\rangle + x_4(t) \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \otimes |n-1\rangle. \quad (33)$$

A condição inicial determina as condições iniciais para as amplitudes $x_j(t)$, $j = 1, \dots, 4$ como sendo

$$x_1(0) = \cos\alpha, \quad x_2(0) = \sin\alpha, \quad x_3(0) = 0, \quad x_4(0) = 0. \quad (34)$$

Use então a equação de Schrödinger e o ansatz (33) para obter quatro equações diferenciais acopladas para as amplitudes $x_j(t)$:

$$\begin{cases} i \frac{dx_1}{dt} = n\omega x_1 + g\sqrt{n+1}x_4 \\ i \frac{dx_4}{dt} = n\omega x_4 + g\sqrt{n+1}x_1 \end{cases} \quad \begin{cases} i \frac{dx_2}{dt} = n\omega x_2 + g\sqrt{n}x_3 \\ i \frac{dx_3}{dt} = n\omega x_3 + g\sqrt{n}x_2 \end{cases}$$

2. Obtenha a solução dessas equações que satisfaz as condições iniciais (34) e escreva a matriz densidade reduzida $\hat{\rho}_s(t)$ para o sistema de dois spins em termos das funções $\{x_j(t)\}$ como uma matriz 4×4 na base do espaço de fase de dois spins ordenada como $\left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle$, $\left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle$, $\left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle$, $\left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle$ tomando o traço sobre o espaço de fase do modo harmônico A :

¹¹v. Z.-J. Li, J.-Q. Li, Y.-H. Jin and Y.-H. Nie, *Time evolution and transfer of entanglement between an isolated atom and a Jaynes-Cummings atom*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys **40**, 3401-3411 (2007).

$$\hat{\rho}_s(t) = \text{Tr}_A [|t\rangle\langle t|].$$

Note que, para obter as equações nessa forma, é preciso usar explicitamente a condição de ressonância $\epsilon = \hbar\omega$.

3. Estude a dinâmica do emaranhamento de $\hat{\rho}_s(t)$ através da negatividade, obtendo uma expressão para essa quantidade em termos das funções $x_j(t)$. **Sugestão:** o cálculo da negatividade neste caso, como no caso encontrado na aula de exercício anterior, é simplificado pela estrutura particular do operador densidade $\hat{\rho}_s(t)$ que, em termos da base usada e com o ordenamento proposto, é dado por uma matriz densidade da forma

$$\hat{\rho}_s(t) = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & d & 0 \\ 0 & d^* & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a \end{pmatrix}$$

cuja transposição parcial é

$$(\mathcal{T}_1 \otimes 1_2) \hat{\rho}_s(t) = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & d^* \\ 0 & b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c & 0 \\ d & 0 & 0 & a \end{pmatrix}.$$

Dessa forma pode haver no máximo um único autovalor negativo o qual, quando existe, é dado por $a - |d|$. A negatividade é portanto dada por $\text{Sup}\{0, |d| - a\}$.

4. Reproduza os resultados mostrados na figura 2 do trabalho de Li et al. usando $n = 3$ e os valores $\pi/4$, $\pi/6$ e $\pi/12$ para o ângulo α . Qual o comportamento da quantidade $|d| - a$, que é relevante para a negatividade, quando ela se torna negativa?

Note que é possível e fácil calcular também o operador densidade reduzido de outros subsistemas, como - que é formado pelo spin $\hat{s}^{(1)}$ e pelo modo harmônico (que não interagem diretamente!), tomando o traço sobre $\hat{s}^{(2)}$, estudar a negatividade desse operador densidade reduzido, etc.

Bibliografia

- [1] Alguns detalhes do cálculo podem ser encontrados em P. Tommasini et al., *Am. J. Phys.* **66**, 881-886 (1998).
- [2] A. Einstein, B. Podolski and N. Rosen, *Phys. Rev.* **47**, 777 (1935).
- [3] E. Schrödinger, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **31**, 555 (1935) e *ibid.* **32**, 446 (1936).
- [4] J. F. Clauser and A. Shimony, *Rep. Progr. Phys.* **41**, 1881 (1978).
- [5] N. Bohr, *Phys. Rev.* **48**, 696 (1935).
- [6] J. S. Bell, *Physics* **1**, 195 (1964). Reproduzido em J. S. Bell, *Speakable and unspeakable in quantum mechanics*, Cambridge U. Press, Cambridge, 1987.
- [7] João C. A. Barata, *Desigualdades de Bell*, em *100 anos de Física Quântica*, M. S. Hussein e S. R. A. Salinas, eds., Editora Livraria da Física (2002).
- [8] N. D. Mermin, *Am. J. Phys.* **49**, 940 (1981).
- [9] E. Nelson, *Space, Time, Chance*, texto disponível em <http://www.princeton.math.edu/~nelson/papers/>.
- [10] J. F. Clauser, M. A. Horne, A. Shimony and R. A. Holt, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 880 (1969).
- [11] J. S. Bell, *Proceedings of the International School of Physics 'Enrico Fermi', course II: Foundations of Quantum Mechanics*. Academic Press, New York, 171-181 (1971). Reproduzido em J. S. Bell, *Speakable and unspeakable in quantum mechanics*, Cambridge U. Press, Cambridge, 1987.
- [12] S. J. Freedman and J. F. Clauser, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 938 (1972); J. F. Clauser and M. A. Horne, *Phys. Rev.* **D10**, 526 (1974).; A. Aspect, *Phys. Rev.* **D14**, 1944 (1976); A. Aspect, P. Grangier and G. Roger, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 460 (1981); A. Aspect, J. Dalibard and G. Roger, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1804 (1982).
- [13] A. J. Leggett, *Foundations of Physics* **33**, 1469 (2003).
- [14] S. Cröblacher, T. Paterek, R. Kaltenbaek, Č. Brukner, M. Żukowski, M. Aspelmeyer and A. Zeilinger, *Nature* **446**, 871 (2007).
- [15] D. Bruß, *Journal of Mathematical Physics*, **43**, 4237 (2002).
- [16] F. Mintert, A. R. R. Carvalho, M. Kuś and A. Buchleitner, *Phys. Reports* **415**, 207 (2005).

- [17] M. Horodeckim P. Horodecki and R. Horodecki, *Phys. Lett.* **A223**, 1 (1996).
- [18] M. Horodecki and P. Horodecki, *Phys. Rev.* **A59**, 4206 (1999).
- [19] G. Vidal and R. F. Werner, *Phys. Rev.* **A65**, 032314 (2002).
- [20] A. F. R. de Toledo Piza and M. C. Nemes, *Phys. Lett.* **A290**, 6 (2001); A. F. R. de Toledo Piza, *Mecânica Quântica*, EDUSP (2003), seção 2.4.1.
- [21] K. Koshino and A. Shimizu, *Physics Reports* **412**, 192 (2005).
- [22] B. Misra and E. C. G. Sudarshan, *J. Math. Phys.* **18**, 756 (1977).
- [23] e.g. W. M. Itano, D. J. Henzen, J. J. Bollinger and D. J. Wineland, *Phys. Rev.* **41**, 2295 (1990); E. W. Streed, J. Mun, M. Boyd, G. K. Campbell. P. Medley, W. Ketterle and D. E. Pritchard, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 260402 (2006).
- [24] J. Preskill, *Physics 229: Advanced Mathematical Methods of Physics - Quantum Computation and information*. California Institute of Technology, 1998.
URL: <http://www.theory.caltech.edu/people/preskill/ph229/>
- [25] K. Hornberger, *Lect. Notes Phys.*, **768** 223 (2009). Disponível em [arXiv:quant-ph/0612118v3](https://arxiv.org/abs/quant-ph/0612118v3) 5 Nov 2008.
- [26] J. P. Paz and W. H. Zurek, *Environment-induced decoherence and the transition from quantum to classical*, em 72nd Les Houches Summer School on “Coherent Matter Waves”, disponível em [arXiv:quant-ph/0010011v1](https://arxiv.org/abs/quant-ph/0010011v1) 2 Oct 2000.
- [27] M. Schlosshauer, *Decoherence and the Quantum-to-Classical Transition*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, corrected second printing 2008.
- [28] T. Yu and J. H. Eberly, *Science* **323**, 598 (2009).
- [29] M. P. Almeida, F. de Melo, M. Hor-Meyll, A. Salles, S. P. Walborn, P. H. Souto Ribeiro and L. Davidovich, *Science* **316**, 597 (2007).
- [30] Z.-J. Li, J.-Q. Li, Y.-H. Jin and Y.-H. Nie, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **40**, 3401-3411 (2007).