

# Formalismo do operador densidade e o emanhamento

Pedro C.S. Costa

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas-CBPF

pedroif@cbpf.br

## Contents

<b>I O Operador Densidade</b>	1
1 O conceito de uma mistura estatística de estados . . . . .	1
2 O caso puro. Introdução da matriz densidade . . . . .	1
3 Uma mistura estatística de estados (caso não puro) . . . . .	3
4 Matriz densidade na mecânica estatística . . . . .	9
<b>II Conceitos básicos de estados emanhados</b>	10
5 Estados emanhados . . . . .	10
6 Critério de separabilidade e medidas de emanhamento . . . . .	15

## Part I. O Operador Densidade

### 1 O conceito de uma mistura estatística de estados

Quando temos informação incompleta sobre um sistema o conceito de probabilidade surge naturalmente. Por exemplo quando um fóton é emitido por uma fonte natural de luz sabemos que ele pode estar em qualquer estado de polarização possível com igual probabilidade. Similrmente, um sistema em equilíbrio termodinâmico com temperatura  $T$  possui uma probabilidade proporcional a  $e^{-E_n/kT}$  em estar num estado de energia  $E_n$ .

De maneira mais geral, uma informação incompleta que temos sobre um sistema na mecânica quântica (MQ) é tratada da seguinte maneira: o estado de um sistema pode estar no estado  $|\psi_1\rangle$  com probabilidade  $p_1$  ou no estado  $|\psi_2\rangle$  com probabilidade  $p_2$ , etc. Podemos escrever da seguinte forma esses possíveis estados

$$\{p_i; |\psi_i\rangle\},$$

e obviamente  $\sum_i p_i = 1$ . Nesse caso dizemos que estamos tratando com uma **mistura estatística** de estados  $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots$  com probabilidades  $p_1, p_2, \dots$ .

Por se tratar de MQ devemos notar que quando estamos tratando com uma mistura estatística estamos tratando com dois conceitos de probabilidades simultaneamente:

1. a incompleta natureza da informação inicial do estado em que se encontra o sistema;
2. e a incerteza relacionada ao processo de medida, postulados de medida.

### 2 O caso puro. Introdução da matriz densidade

Antes de estudar o caso geral, iremos iniciar examinando o caso simples onde o estado do sistema é perfeitamente conhecido. Tal sistema é chamado de **estado puro**. Mostraremos aqui que caracterizar pelo seu vetor de estado é completamente equivalente que caracterizá-lo por um certo operador agindo em seu espaço de Hilbert, o operador densidade.

## 2.1 Descrição pelo vetor de estado

Considere um sistema cujo vetor de estado em um instante  $t$  é:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\phi_n\rangle,$$

em que  $\{|\phi_n\rangle\}$  forma uma base ortonormal no espaço de Hilbert,  $\mathbb{C}^n$ , discreta. Os coeficientes satisfazem

$$\sum_n |c_n|^2 = 1. \quad (1)$$

Se  $A$  é um espectro discreto observável, e sabendo que ele pode ser expandido em termos de uma base  $\{|\phi_m\rangle \langle\phi_n|\}_{m,n=1,2,\dots}$  temos que seus elementos de matriz são dados por

$$\langle\phi_m|A|\phi_n\rangle = A_{mn}, \quad (2)$$

e o valor médio de  $A$  em um dado instante de tempo  $t$  é

$$\langle A \rangle(t) = \langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = \sum_{m,n} c_m^*(t) c_n(t) A_{mn}. \quad (3)$$

## 2.2 Descrição pelo operador densidade

Vemos que a partir da Eq.(3) os coeficientes  $c_n(t)$  aparecem no cálculo do valor esperado através de expressões quadráticas do tipo  $c_m^*(t) c_n(t)$ . Vemos que estes elementos nada mais são do que elementos de matriz do operador  $|\psi(t)\rangle \langle\psi(t)|$ , que é o projetor sobre o ket  $|\psi(t)\rangle$

$$\langle\phi_m|(|\psi(t)\rangle \langle\psi(t)|)|\phi_n\rangle = c_n^*(t) c_m(t).$$

Desta forma é natural introduzir o operador densidade  $\rho(t)$ , definido como

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle\psi(t)|. \quad (4)$$

O operador densidade é representado na base  $\{|\phi_n\rangle\}$  por uma matriz chamada matriz densidade cujos elementos são

$$\rho_{mn}(t) = \langle\phi_m|\rho(t)|\phi_n\rangle = c_n^*(t) c_m(t), \quad (5)$$

e desta forma é natural escrevermos

$$\rho(t) = \sum_{m,n} \rho_{mn}(t) |\phi_m\rangle \langle\phi_n|. \quad (6)$$

Como próximo passo iremos mostrar que  $\rho(t)$  é suficiente para caracterizar o estado quântico do sistema, isto é, podemos obter todas as predições físicas que podem ser calculadas a partir de  $|\psi(t)\rangle$ . Para fazermos isso vamos escrever as Eqs.(1) e (2) assim como o equivalente da Eq. de Schrödinger em termos do operador densidade. De acordo com a Eq.(5) vemos que a relação da Eq.(1) indica que a soma dos elementos diagonais da matriz densidade é igual a 1, ou seja

$$\sum_n |c_n(t)|^2 = \sum_n \rho_{nn},$$

portanto

$$\text{Tr}\rho(t) = 1. \quad (7)$$

Agora a Eq.(2) com o uso da Eq.(5) temos

$$\begin{aligned} \langle A \rangle(t) &= \sum_{m,n} \rho_{mn}(t) A_{nm} \\ &= \sum_n \langle\phi_n|\rho(t)A|\phi_n\rangle, \end{aligned}$$

e portanto

$$\langle A \rangle (t) = \text{Tr} [\rho(t) A]. \quad (8)$$

Finalmente, a evolução temporal do operador  $\rho(t)$  pode ser deduzido a partir da equação de Schrödinger, logo

$$\begin{aligned} \frac{d\rho(t)}{dt} &= \left( \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \right) \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle \left( \frac{d}{dt} \langle \psi(t)| \right), \\ &= \frac{1}{i\hbar} H(t) |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| + \frac{1}{(-i\hbar)} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| H(t), \\ &= \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)]. \end{aligned} \quad (9)$$

Por completeza devemos indicar como calcular a partir de  $\rho(t)$  a probabilidade  $\mathcal{P}(a_n)$  de se obter um autovalor não degenerado  $a_n$  a partir de um observável  $A$ . Sendo  $\Pi_n$  o projetor sobre o autoespaço associado com  $a_n$  sabemos que

$$\mathcal{P}(a_n) = \langle \psi(t) | \Pi_n | \psi(t) \rangle, \quad (10)$$

de onde fica evidente que

$$\mathcal{P}(a_n) = \text{Tr} [\Pi_n \rho(t)]. \quad (11)$$

### 2.3 Propriedades do operador densidade em um caso puro

Vimos que em uma caso puro um sistema pode ser descrito tão bem pelo operador densidade quanto pelo vetor de estado. Entretanto, o operador densidade apresenta um certo número de vantagens.

Primeiramente, vemos que a partir da Eq.(4) que dois vetores  $|\psi(t)\rangle$  e  $e^{i\theta} |\psi(t)\rangle$ , que descrevem o mesmo estado físico, correspondem ao mesmo operador densidade. Desta forma usando esse operador eliminamos a existência de qualquer fator de fase global arbitrário para o vetor de estado. Além disso vemos que a partir das Eqs.(7), (8) e (11) que as fórmulas usando o operador densidade são lineares em relação a ele enquanto as Eqs.(3) e (10) são quadráticas em relação ao ket  $|\psi(t)\rangle$ .

Por fim vamos mostrar algumas propriedades de  $\rho(t)$  que podem ser deduzidas diretamente de sua definição,

$$\begin{aligned} \rho^\dagger(t) &= \rho(t), \\ \rho^2(t) &= \rho(t), \\ \text{Tr} \rho^2(t) &= 1. \end{aligned}$$

As duas últimas relações, que seguem do fato que  $\rho(t)$  é um projetor, são verdades somente no estado puro.

## 3 Uma mistura estatística de estados (caso não puro)

### 3.1 Definição do operador densidade

Vamos retornar ao caso geral. considere um sistema o qual (em um dado tempo) as várias probabilidades  $p_1, p_2, \dots, p_k, \dots$  são arbitrárias, sobre a condição que elas satisfaçam as relações

$$\begin{cases} 0 & \leq p_1, p_2, \dots, p_k, \dots \leq 1, \\ \sum_k p_k & = 1. \end{cases}$$

Sobre essas condições, como calcular a probabilidade  $\mathcal{P}(a_n)$  que uma medida de um observável  $A$  irá fornecer o resultado  $a_n$ ?

Seja

$$\mathcal{P}_k(a_n) = \langle \psi_k | \Pi_n | \psi_k \rangle,$$

a probabilidade de achar  $a_n$  se o vetor de estado for  $|\psi_k\rangle$ . Para obtermos a probabilidade desejada  $\mathcal{P}(a_n)$  devemos multiplicar  $\mathcal{P}_k(a_n)$  pelo fator de peso  $p_k$  e então somar sobre  $k$ . Vamos escrever

$$\mathcal{P}_k(a_n) = \Pr[a_n|k]$$

sendo a probabilidade de obtermos  $a_n$  dado que temos o vetor de estado  $|\psi_k\rangle$ , ou seja, uma probabilidade condicional, então

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_k \Pr[a_n|k] p_k, \quad (12)$$

mas a partir da Eq.(11), temos

$$\Pr[a_n|k] = \text{Tr}[\Pi_n \rho_k], \quad (13)$$

em que  $\rho_k = |\psi_k\rangle \langle \psi_k|$  é o operador densidade correspondente ao vetor de estado  $|\psi_k\rangle$ . Substituindo a Eq.(13) na Eq.(12) temos

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(a_n) &= \sum_k \text{Tr}[\Pi_n \rho_k] p_k, \\ &= \sum_k \text{Tr}[p_k \Pi_n \rho_k], \\ &= \text{Tr}[\Pi_n \rho], \end{aligned} \quad (14)$$

em que na segunda linha utilizamos o caráter linear do operador traço. Portanto temos

$$\rho = \sum_k p_k \rho_k. \quad (15)$$

Nós portanto vemos que a linearidade das fórmulas que usam o operador densidade, possibilita-nos expressar todas as predições físicas em termos de  $\rho$ , a média dos operadores densidade  $\rho_k$ .  $\rho$  é, por definição, o operador densidade do sistema.

### 3.2 Propriedades gerais do operador densidade

A propriedade que podemos ver de imediato é que o traço do operador densidade, mesmo num caso de mistura estatística, continua sendo igual a um,

$$\begin{aligned} \text{Tr} \rho &= \sum_k p_k \text{Tr}[|\psi_k\rangle \langle \psi_k|], \\ &= \sum_k p_k \langle \psi_k | \psi_k \rangle, \\ &= \sum_k p_k, \\ &= 1. \end{aligned}$$

Outra propriedade importante que podemos facilmente ver é a positividade do operador  $\rho$ . Tomemos um ket,  $|\psi\rangle$ , arbitrário a partir da Eq.(15) vemos que

$$\begin{aligned} \langle \phi | \rho | \phi \rangle &= \sum_k p_k \langle \phi | (|\psi_k\rangle \langle \psi_k|) | \phi \rangle, \\ &= \sum_k p_k |\langle \phi | \psi_k \rangle|^2, \\ &\geq 0, \end{aligned} \quad (16)$$

portanto,

$$\langle \phi | \rho | \phi \rangle \geq 0, \quad \forall |\psi\rangle \in \mathbb{C}^n. \quad (17)$$

Vimos que podemos expressar  $\mathcal{P}(a_n)$  em termos de  $\rho$ . Com o uso da Eq.(14) vamos verificar se a Eq.(8) continua válida para o caso de uma mistura estatística,

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \sum_n a_n \mathcal{P}(a_n), \\ &= \sum_n a_n \text{Tr}[\Pi_n \rho], \\ &= \text{Tr} \left[ \sum_n a_n \Pi_n \rho \right], \\ &= \text{Tr}[A\rho],\end{aligned}\tag{18}$$

pois pelo teorema espectral

$$A = \sum_n a_n \Pi_n.$$

Da mesma maneira que fizemos antes para o caso puro, vamos calcular a evolução temporal do operador densidade. Para isso vamos assumir que a Hamiltoniana do sistema  $H(t)$  é bem conhecida, embora o estado não seja. Podemos sem maiores problemas mostrar que se o sistema em um tempo inicial  $t_0$  tem probabilidade  $p_k$  de estar no estado  $|\psi_k\rangle$ , então, em um tempo subsequente  $t$ , ele possui a mesma probabilidade  $p_k$  de estar no estado  $|\psi_k(t)\rangle$  dado por

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_k(t)\rangle &= H(t) |\psi_k(t)\rangle, \\ |\psi_k(t_0)\rangle &= |\psi_k\rangle.\end{aligned}$$

O operador densidade num dado instante  $t$  será então dado por  $\rho(t) = \sum_k p_k \rho_k(t)$  com

$$\rho_k(t) = |\psi_k(t)\rangle \langle \psi_k(t)|,$$

e de acordo com a Eq.(9),  $\rho_k(t)$  obedece a equação de evolução dada por

$$\frac{d\rho_k(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho_k(t)],$$

e pela linearidade das equações anteriores em relação a  $\rho_k(t)$  temos que

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)].$$

Uma vez que pela solução da equação de Schrödinger temos que a evolução temporal de um estado é dado por um operador unitário

$$U = e^{-\frac{i}{\hbar} H t},$$

a evolução temporal do nosso operador densidade é

$$U\rho U^\dagger.$$

Observemos que agora  $\rho$  não é mais um projetor e temos em geral que

$$\rho^2 \neq \rho$$

e consequentemente

$$\text{Tr}\rho^2(t) \leq 1.$$

### 3.3 Populações e coerências

Começamos esta subseção com a seguinte pergunta:

Qual o significado físico dos elementos de matriz  $\rho_{np}$  de  $\rho$  em termos da base  $\{|\phi_n\rangle\}$ ?

Vamos iniciar analisando os elementos diagonais  $\rho_{nn}$ . A partir das Eqs.(6) e (15), temos

$$\begin{aligned}\rho_{nn} &= \langle \phi_n | \rho | \phi_n \rangle, \\ &= \left\langle \phi_n \left| \sum_k p_k \rho_k \right| \phi_n \right\rangle, \\ &= \sum_k p_k \langle \phi_n | \rho_k | \phi_n \rangle, \\ &= \sum_k p_k [\rho_k]_{nn},\end{aligned}$$

e pela Eq.(5) concluímos que

$$\rho_{nn} = \sum_k p_k \left| c_n^{(k)} \right|^2, \quad (19)$$

em que  $\left| c_n^{(k)} \right|^2$  é um número positivo real, cuja interpretação física é a seguinte: se o estado do sistema é  $|\psi_k\rangle$ , esta quantidade nos fornece a probabilidade de achar, em uma medida, esse sistema no estado  $|\phi_n\rangle$ . De acordo com a Eq.(19), se levarmos em conta a indeterminância do estado antes da medida,  $\rho_{nn}$  representa a média de probabilidade de encontrarmos o sistema no estado  $|\phi_n\rangle$ . Por essa razão,  $\rho_{nn}$  é chamado de **população** do estado  $|\phi_n\rangle$ .

Um cálculo análogo ao anterior, mas agora para os termos não diagonais  $\rho_{nq}$ , fornece-nos a seguinte expressão

$$\rho_{nq} = \sum_k p_k c_n^{(k)} c_p^{(k)*}, \quad (20)$$

em que  $c_n^{(k)} c_p^{(k)*}$  é um termo cruzado. Isto expressa os termos de interferência entre os estados  $|\phi_n\rangle$  e  $|\phi_p\rangle$  que aparecem quando o estado  $|\psi_k\rangle$  esta numa superposição linear desses estados. De acordo com a Eq.(20)  $\rho_{nq}$  é a média desses termos cruzados, considerando todos os possíveis estados da mistura estatística. Em contraste com as populações  $\rho_{nq}$  pode ser zero mesmo que nenhum dos produtos  $c_n^{(k)} c_p^{(k)*}$  seja : enquanto  $\rho_{nn}$  é uma de números positivos (ou zero) reais,  $\rho_{nq}$  é uma soma de números complexos. Caso  $\rho_{nq}$  seja zero, isto significa que a média Eq.(20) cancelou qualquer termo de interferência entre  $|\phi_n\rangle$  e  $|\phi_p\rangle$ . Esta é a razão dos elementos não diagonais  $\rho_{nq}$  serem chamados de **coerências**.

### 3.3.1 Comentários

Antes de terminarmos esta subseção vamos comentar e analisar propriedades importantes do formalismo dos operadores densidade.

1. A distinção entre populações e coerências depende da base  $\{|\phi_n\rangle\}$  escolhida no espaço de estados. Uma vez que  $\rho$  é hermitiano, é sempre possível achar uma base ortonormal  $\{|\xi_l\rangle\}$  em que  $\rho$  seja diagonal. Desta forma,  $\rho$  pode ser escrito como

$$\rho = \sum_l \pi_l |\xi_l\rangle \langle \xi_l|,$$

uma vez que  $\rho$  é positivo e  $\text{Tr}\rho = 1$ , temos

$$\begin{cases} 0 \leq \pi_l \leq 1, \\ \sum_l \pi_l = 1, \end{cases}$$

então  $\rho$  pode ser visto como uma mistura estatística de estados  $|\xi_l\rangle$  com probabilidades  $\pi_l$  (sem termos de coerência).

2. Se os kets  $|\phi_n\rangle$  são autovetores do Hamiltoniano  $H$ , que é independente do tempo

$$H |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle,$$

e pela Eq.(9),

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_{n,p} \frac{d\rho_{np}(t)}{dt} |\phi_n\rangle \langle \phi_p| &= \sum_{n,p} \rho_{np}(t) (H |\phi_n\rangle \langle \phi_p| - |\phi_n\rangle \langle \phi_p| H), \\ &= \sum_{n,p} \rho_{np}(t) (E_n |\phi_n\rangle \langle \phi_p| - E_p |\phi_n\rangle \langle \phi_p|), \end{aligned}$$

portanto

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{nn}(t) &= 0 \\ i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{np}(t) &= (E_n - E_p) \rho_{np}, \end{aligned}$$

isto é

$$\begin{cases} \rho_{nn}(t) = \text{constante}, \\ \rho_{np}(t) = \rho_{np}(0) e^{i/\hbar(E_p - E_n)t}. \end{cases}$$

3. Por fim, a partir da Eq.(17) podemos provar a desigualdade

$$\rho_{nn} \rho_{pp} \geq |\rho_{np}|^2,$$

que mostra que  $\rho$  somente pode ter coerências entre os estados cujas populações são diferentes de zero.

### 3.4 Descrição separada de uma parte de um sistema físico. O conceito de traço parcial

Vamos considerar dois sistemas diferentes (1) e (2) e o sistema global (1) + (2), cujo espaço de estados é o produto tensorial

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2.$$

Seja  $\{|\phi_n\rangle\}$  a base de  $\mathcal{H}_1$  e  $\{|\varphi_p\rangle\}$  a base  $\mathcal{H}_2$ , os kets  $|\phi_n\rangle |\varphi_p\rangle$  formam uma base de  $\mathcal{H}$ . O operador densidade  $\rho$  do sistema global é um operador que age em  $\mathcal{H}$ . Vamos construir um operador  $\rho^{(1)}$  (ou  $\rho^{(2)}$ ) que age somente em  $\mathcal{H}_1$  (ou  $\mathcal{H}_2$ ) que irá nos possibilitar fazer previsões físicas sobre medidas realizadas somente no sistema (1) ou somente no sistema (2). Essa operação será chamada de traço parcial com respeito a (2) (ou a (1)).

Vamos introduzir o operador  $\rho^{(1)}$  cujos elementos de matriz são

$$\langle \phi_n | \rho^{(1)} | \phi_{n'} \rangle = \sum_p (\langle \phi_n | \langle \varphi_p | \rho | \phi_{n'} \rangle | \varphi_p \rangle). \quad (21)$$

Por definição,  $\rho^{(1)}$  é obtido a partir de  $\rho$  através do traço parcial sobre o sistema (2),

$$\rho^{(1)} = \text{Tr}_2 \rho.$$

Similarmente

$$\rho^{(2)} = \text{Tr}_1 \rho,$$

possui elementos de matriz

$$\langle \varphi_p | \rho^{(2)} | \varphi_{p'} \rangle = \sum_n (\langle \phi_n | \langle \varphi_p | \rho | \phi_n \rangle | \varphi_{p'} \rangle).$$

A partir das definições dos traços parciais e a partir do traço de  $\rho$ ,

$$\text{Tr} \rho = \sum_n \sum_p (\langle \phi_n | \langle \varphi_p | \rho | \phi_n \rangle | \varphi_p \rangle),$$

fica fácil de ver que

$$\mathrm{Tr}_1 [\mathrm{Tr}_2 \rho] = \mathrm{Tr}_2 [\mathrm{Tr}_1 \rho],$$

e ainda que

$$\begin{cases} \mathrm{Tr} \rho^{(1)} = 1, \\ \mathrm{Tr} \rho^{(2)} = 1. \end{cases}$$

Seja, agora,  $A^{(1)}$  o observável agindo em  $\mathcal{H}_1$  e  $\tilde{A} = A^{(1)} \otimes I^{(2)}$ , sua extensão em  $\mathcal{H}$  em que  $I^{(2)}$  é o operador identidade agindo em  $\mathcal{H}_2$ . A partir da definição (18)

$$\begin{aligned} \langle \tilde{A} \rangle &= \mathrm{Tr} [\rho A], \\ &= \sum_{n,p} (\langle \phi_n | \langle \varphi_p | \rho A | \phi_n \rangle | \varphi_p \rangle), \end{aligned}$$

usando-se a relação de fechamento em termos da base  $\{|\phi_n\rangle | \varphi_p\rangle\}$  e usando  $\tilde{A} = A^{(1)} \otimes I^{(2)}$ ,

$$= \sum_{n',p'} \sum_{n,p} (\langle \phi_n | \langle \varphi_p | \rho | \phi_{n'} \rangle | \varphi_{p'} \rangle) (\langle \phi_{n'} | \langle \varphi_{p'} | A^{(1)} \otimes I^{(2)} | \phi_n \rangle | \varphi_p \rangle),$$

aplicando-se  $I^{(2)}$  em  $\mathcal{H}_2$

$$\begin{aligned} &= \sum_{n',p'} \sum_{n,p} (\langle \phi_n | \langle \varphi_p | \rho | \phi_{n'} \rangle | \varphi_{p'} \rangle) \langle \phi_{n'} | A^{(1)} | \phi_n \rangle \delta_{p,p'}, \\ &= \sum_{n,n'} \left( \sum_p \langle \phi_n | \langle \varphi_p | \rho | \phi_{n'} \rangle | \varphi_p \rangle \right) \langle \phi_{n'} | A^{(1)} | \phi_n \rangle, \end{aligned}$$

é fácil de ver, pela Eq.(21), que o termo que está dentro dos parênteses são os elementos de matriz de  $\rho^{(1)}$ , então

$$\begin{aligned} \langle \tilde{A} \rangle &= \sum_{n,n'} \rho_{nn'}^{(1)} A_{n'n}^{(1)} \\ &= \mathrm{Tr} [\rho^{(1)} A^{(1)}]. \end{aligned} \tag{22}$$

Conclui-se aqui que o traço parcial  $\rho^{(1)}$  possibilita-nos calcular o valor médio  $\langle \tilde{A} \rangle$  como se o sistema (1) fosse isolado e tivesse  $\rho^{(1)}$  como operador densidade.

### 3.4.1 Comentário

Se o sistema global é dado por

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle \otimes |\chi\rangle,$$

podemos verificar diretamente que o operador densidade do sistema é dado por

$$\rho = \sigma \otimes \tau, \tag{23}$$

com  $\sigma = |\phi\rangle \langle \phi|$  e  $\tau = |\chi\rangle \langle \chi|$ . Quando temos nosso sistema global dado pelo operador densidade  $\rho$  que como ser fatorado como o da Eq.(23) que pode ser fatorado, o traço parcial nos fornece

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}_2 \rho &= \sigma, \\ \mathrm{Tr}_1 \rho &= \tau. \end{aligned}$$



## 4 Matriz densidade na mecânica estatística

Nesta seção veremos como aplicar a matriz densidade na mecânica estatística, para um maior aprofundamento veja [4]

Seja  $|\varphi_i\rangle$  um autovetor e  $E_i$  o correspondente autovalor da Hamiltoniana  $H$  do sistema, a probabilidade de que o sistema esteja no estado  $|\varphi_i\rangle$  é

$$\frac{e^{-\beta E_i}}{Z},$$

sendo  $\beta = (k_B T)^{-1}$ , com  $T$  sendo a temperatura do sistema e  $k_B$  a constante de Boltzman. Então, o operador densidade é dada por

$$\rho = \sum_n \rho_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|, \quad (24)$$

sendo  $\rho_n = e^{-\beta E_n} / Z$ . Em particular, na representação de coordenadas,

$$\rho(x, x') = \sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \varphi_n(x) \varphi_n^*(x').$$

Como  $|\varphi_n\rangle$  são autoestados da Hamiltoniana,  $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$ , então a equação (24) toma a seguinte forma,

$$\rho = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta H} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| = \frac{e^{-\beta H}}{Z}.$$

Mas, pela condição de normalização,  $\text{Tr}\rho = 1$ , fica fácil ver que  $Z$  é a função de partição,

$$\begin{aligned} Z &= \sum_n e^{-\beta E_n} \\ &= e^{-\beta F} \\ &= \text{Tr}[e^{-\beta H}] \end{aligned}$$

Portanto,

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Tr}[e^{-\beta H}]}.$$

A energia média do sistema,  $U$ , pode ser calculada como

$$U = \text{Tr}H\rho = \frac{\text{Tr}[He^{-\beta H}]}{\text{Tr}[e^{-\beta H}]}.$$

Quando nós sabemos a energia livre e a energia do sistema, a entropia pode ser obtida por

$$F = U - TS.$$

Vamos agora escrever a matriz densidade como uma função de  $\beta$ ,

$$\rho(\beta) = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Tr}[e^{-\beta H}]}.$$

É possível mostrar que  $\rho(\beta)$  satisfaz a seguinte equação diferencial

$$-\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = H\rho. \quad (25)$$

Trabalhando-se com o caso não normalizado  $\rho_U(\beta) = e^{-\beta H}$  fica mais fácil de ver que  $\rho$  satisfaz a equação acima.

## 4.1 Matriz densidade para a partícula livre unidimensional

Neste caso temos a Hamiltoniana dada por

$$H = \frac{p^2}{2m},$$

sendo  $m$  a massa da partícula. A equação diferencial (25) na representação de coordenadas toma a seguinte forma

$$-\frac{\partial \rho(x, x', \beta)}{\partial \beta} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, x', \beta).$$

Vemos que essa equação acima nada mais é do que a equação de difusão. Desta forma podemos facilmente chegar em sua solução

$$\rho(x, x', \beta) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}} \exp\left[-\left(\frac{m}{2\hbar^2\beta}\right)(x-x')^2\right], \quad (26)$$

dado

$$\rho(x, x', 0) = \delta(x - x')$$

como condição de contorno.

Para um sistema linear de comprimento  $L$ , o traço da equação (26) nos leva a

$$e^{-\beta F} = \int \rho(x, x') dx = L \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}}.$$

# Part II. Conceitos básicos de estados emaranhados

## 5 Estados emaranhados

Conforme vimos de forma breve anteriormente sistemas quânticos compostos são sistemas que naturalmente se decompõe em dois ou mais subsistemas, em que cada um desses subsistemas é um próprio sistema quântico. Normalmente, o espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  associado com um sistema composto é dado pelo produto tensorial

$$\mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N,$$

dos espaços correspondendo a cada um dos subsistemas.

Nas próximas subseções continuaremos a trabalhar somente com sistemas compostos de apenas dois subsistemas ambos de dimensão finita,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2.$$

### 5.1 Estado puro

Iniciamos esta subseção com a definição de estado emaranhado para estados puros.

- **Definição 4.1** Seja  $|\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_1$  e  $|\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_2$  dizemos que  $|\psi\rangle$  é um estado emaranhado se

$$\nexists |\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_1, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_2; \quad |\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle.$$

Vamos analisar com um pouco mais de detalhe propriedades de medidas para estados emaranhados. Vamos voltar a discussão sobre medidas num estado puro bipartido não emaranhado, ou seja um estado separável

$$|\psi_S\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle. \quad (27)$$

Quando estamos trabalhando somente com medidas locais, ou seja, quando temos acesso somente a um subsistema por vez. Após a medida de qualquer observável local, onde no nosso exemplo trabalhado agimos no primeiro subsistema,  $\tilde{A} = A^{(1)} \otimes I^{(2)}$ , temos que o primeiro subsistema irá ser projetado para um autoestado de  $A^{(1)}$  enquanto o estado do segundo permanecerá inalterado. Se em seguida realizarmos uma segunda medição local, mas agora no segundo subsistema, este resultado será independente do resultado da primeira medida feita no primeiro subsistema. Pode-se concluir que resultados de medidas em diferentes subsistemas são não correlacionados entre si e dependem somente dos seus próprios estados.

Vamos agora para um caso puro em  $\mathcal{H}$  que é dado pela sobreposição de estados puros da forma anterior, de tal forma que temos um estado emaranhado

$$|\psi_e\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle + |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle].$$

Podemos novamente nos perguntar qual é a forma do estado  $|\psi_e\rangle$  após acessarmos somente um dos subsistemas. Conforme visto na Eq.(22) para um operador da forma  $\tilde{A} = A^{(1)} \otimes I^{(2)}$ , temos

$$\langle \tilde{A} \rangle = \text{Tr} [\sigma_1 A^{(1)}], \quad (28)$$

em que  $\sigma_1 = \text{Tr}_2 |\psi_e\rangle \langle \psi_e|$  é a matriz reduzida do primeiro subsistema. Uma vez que a Eq.(28) se mantém para qualquer operador local  $A^{(1)}$ , precisamos concluir se o estado do primeiro sistema sozinho é dado por  $\sigma_1$ , veja (3.4.1). Conforme visto anteriormente a matriz reduzida do segundo subsistema é  $\sigma_2 = \text{Tr}_1 |\psi_e\rangle \langle \psi_e|$ . Entretanto este estado é emaranhado de forma tal que

$$\rho = |\psi_e\rangle \langle \psi_e| \neq \rho_1 \otimes \rho_2.$$

Além disso, se nos realizarmos uma medida local sobre um subsistema, isso nos leva uma redução do estado do sistema total, não somente do subsistema o qual realizamos a medida. Portanto, para os estados emaranhados o resultados medidos da probabilidade de um subsistema qualquer é influenciado por medições anteriores realizadas em outros subsistemas. Desta forma dizemos que os subsistemas são correlacionados.

## 5.2 Estados mistos

Similarmente aos estados puros, os estados produto mistos,

$$\sigma = \rho^{(1)} \otimes \rho^{(2)},$$

com  $\rho^{(1)}$  e  $\rho^{(2)}$  para os respectivos subsistemas, não exibem correlações. Entretanto, uma soma convexa

$$\sigma = \sum_i p_i \rho_i^{(1)} \otimes \rho_i^{(2)}, \quad (29)$$

com  $p_i > 0$  e  $\sum_i p_i = 1$ , irá, em geral, fornecer resultados de medidas correlacionados. Existem observáveis locais  $a$  e  $b$  tais que

$$\text{Tr} [\sigma (a \otimes b)] \neq \text{Tr} [\sigma (a \otimes I)] \text{Tr} [\sigma (I \otimes b)] = \text{Tr} [\sigma_1 a] \text{Tr} [\sigma_2 b].$$

Essas correlações podem ser descritas em termos de probabilidades clássicas  $p_i$ , e são portanto clássicas. Estados da forma da Eq.(29) são chamados de estados mistos separáveis.+

Estados mistos emaranhados são definidos pela não existência de uma decomposição em estados produto.

- **Definição 4.2** Um estado misto  $\sigma$  é um estado emaranhado se não houver estados locais  $\rho^{(1)}$ ,  $\rho^{(2)}$  e pesos não negativos  $p_i$ , tal que  $\sigma$  possa ser escrito como uma soma convexa de mistura, colocando de outra maneira

$$\nexists \rho^{(1)}, \rho^{(2)}, p_i \geq 0; \quad \sigma = \sum_i p_i \rho_i^{(1)} \otimes \rho_i^{(2)}.$$

## 5.3 Aplicabilidade de estados emaranhados

Estados emaranhados são de extrema importância para diversas áreas da mecânica quântica. Podemos fazer uso dessas correlações, por exemplo, para obtermos algoritmos quânticos mais eficientes do que os clássicos, no sentido de número de passos para resolvermos um problema, para enviarmos informação entre dois usuários distantes e mesmo para uma melhor compreensão da passagem do mundo quântico para o clássico entre outros. É exatamente esse último tópico exemplo, juntamente com a transmissão de informação, que iremos detalhar um pouco melhor nessa seção para vermos o quão importante e útil são essas correlações.

### 5.3.1 O emaranhamento o traço parcial e a decoerência-(modelo de Zurek)

Aqui iremos mostrar um exemplo de como o uso do traço parcial juntamente com o conceito de emaranhamento pode nos levar a melhores entendimentos de conceitos de grande importância, e ainda muito explorado na MQ, o fenômeno de decoerência.

Uma das hipóteses da perda de coerência - quando os termos fora da diagonal da matriz densidade tendem rapidamente para zero- é devido ao acoplamento do sistema quântico com um grande reservatório. Tal hipótese considera a vizinhança de um sistema quântico como uma possível fonte da solução do problema da medida da mecânica quântica<sup>1</sup>. De fato, a vizinhança pode ser considerada como um grande reservatório ao nosso dispor, que pode ser definido como um grande sistema que é permanentemente acoplado a qualquer microsistema e não é controlado pelo observador. Em outras palavras, estamos assumindo aqui que qualquer sistema quântico é na verdade um sistema aberto e que parte de uma informação inicial contida no sistema é perdida para o meio, de tal maneira que não temos capacidade de extrair tal informação.

Quando estamos investigando sobre o processo de medida na MQ é natural investigarmos a interação entre o aparato de medida,  $\mathcal{A}$  e o sistema físico  $\mathcal{S}$ . Entretanto, Zurek introduziu um terceiro jogador nesse processo, o meio ambiente,  $\mathcal{E}$  que esta sempre presente quando realizamos a medida, assumindo portanto que sistemas quânticos são essencialmente abertos ao meio ambiente.

A idéia fundamental de Zurek é que quando consideramos o processo de medida nós primeiro escrevemos o vetor de estado para  $\mathcal{A} + \mathcal{S} + \mathcal{E}$ ,  $|\Psi_{\mathcal{AS}\mathcal{E}}\rangle$  e deixamos os sistemas interagirem. Então, aplicamos o traço parcial e obtemos a matriz densidade reduzida somente para o sistema  $\mathcal{A} + \mathcal{S}$ . Desta maneira, enquanto o sistema total  $\mathcal{A} + \mathcal{S} + \mathcal{E}$  permanece emaranhado e é sujeito a evolução unitária, de acordo com a equação de Schrödinger, o sistema reduzido  $\mathcal{A} + \mathcal{S}$ , é uma mistura do ponto de vista do aparato.

O processo de medida pode ser dividido em dois passos distintos seguido pelo traço parcial que completa o processo. O estado inicial ( $t = 0$ ) é por simplicidade um estado fatorável para o sistema total

$$|\Psi_{\mathcal{AS}\mathcal{E}}(0)\rangle = |a_0\rangle |\psi\rangle |\mathcal{E}(0)\rangle. \quad (30)$$

Então, em ( $t = t_1$ ), devido a interação entre  $\mathcal{S}$  e  $\mathcal{A}$ , estes se tornam emaranhados

$$|\Psi_{\mathcal{AS}\mathcal{E}}(t_1)\rangle = \left[ \sum_j c_j |a_j\rangle |o_j\rangle \right] |\mathcal{E}(t_1)\rangle. \quad (31)$$

Em um intervalo temporal  $t_1 \leq t \leq t_2$ , o meio ambiente  $\mathcal{E}$  irá se emaranhar com ambos,  $\mathcal{S}$  e  $\mathcal{A}$

$$|\Psi_{\mathcal{AS}\mathcal{E}}(t \geq t_2)\rangle = \sum_j c_j |a_j\rangle |o_j\rangle |e_j\rangle, \quad (32)$$

em que  $\{|e_j\rangle\}$  é alguma base para o meio ambiente. Finalmente em  $t_2$  a interação é encerrada. A transformação para o estado (31) ocorre, como dito anteriormente, devido a conexão entre os sistemas  $\mathcal{A}$  e  $\mathcal{S}$  e é descrito por

$$U^{\mathcal{AS}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^{t_1} dt H_{\mathcal{AS}}(t)},$$

em que  $H_{\mathcal{AS}}$  é a Hamiltoniana de interação entre o sistema e o aparato e portanto o operador acima é unitário. De maneira análoga a transformação para o estado (32) se procede, mas agora o acoplamento da unitária é entre  $\mathcal{E}$  e  $\mathcal{A} + \mathcal{S}$ ,

$$U^{\mathcal{AS},\mathcal{E}} = e^{-\frac{i}{\hbar} t H_{\mathcal{AS},\mathcal{E}}},$$

para  $t_1 < t < t_2$ .

Agora podemos realizar o traço parcial sobre o meio ambiente e escrever a matriz densidade reduzida correspondente,

$$\begin{aligned} \sigma_{\mathcal{AS}} &= \text{Tr}_{\mathcal{E}} [\rho_{\mathcal{AS}\mathcal{E}}], \\ &= \text{Tr}_{\mathcal{E}} [|\Psi_{\mathcal{AS}\mathcal{E}}(\tau)\rangle \langle \Psi_{\mathcal{AS}\mathcal{E}}(\tau)|], \\ &= \sum_j |c_j|^2 |a_j\rangle \langle a_j| \otimes |o_j\rangle \langle o_j|. \end{aligned} \quad (33)$$

sendo  $\tau > t_2$ .

A Eq.(33) foi obtida assumindo-se as seguintes acima. O significado físico de traçarmos sobre o meio ambiente é o seguinte: A informação contida nos elementos fora da diagonal do sistema acoplado  $\mathcal{A} + \mathcal{S}$  não é destruído, mas sim transferido para o meio ambiente. Entretanto, do ponto de vista do aparato essa informação não é acessível e por essa razão completamente perdida. Uma vez que as coerências são perdidas essa interpretação de medida é conhecida como *decoerência*.

### 5.3.2 Teleporte quântico

Imaginemos a seguinte situação, Cebolinha e Mônica estão separados espacialmente, mas cada um deles possui um estado quântico, de dois níveis (cada um desses estados quântico de dois níveis são chamados de qubits, que são os bits quânticos), que foram maximalmente emaranhados

$$|\beta_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0_C 0_M\rangle + |1_C 1_M\rangle),$$

os subscritos tem com significado qual dos estados Cebolinha e Mônica tem acesso. Agora, Cascão, amigo de Cebolinha prepara um estado quântico  $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^2$

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle,$$

onde  $\alpha$  e  $\beta \in \mathbb{C}$  e  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$  e em seguida fornece esse estado ao Cebolinha. Tanto ele quanto a Mônica não sabem nada sobre a identidade de  $|\psi\rangle$ . Cebolinha gostaria de enviar esse estado para Mônica, mas eles só possuem um canal clássico entre eles, podemos pensar esse canal como uma transmissão via ondas de rádio. Vamos mostrar que basta Cebolinha interagir seu qubit com o estado dado pelo Cascão e enviar apenas dois bits para Mônica, que ela terá como ter o acesso total do estado  $|\psi\rangle$ .

Inicialmente o nosso estado é dado por

$$\begin{aligned} |\Psi_{in}\rangle &= |\psi\rangle \otimes |\beta_{00}\rangle, \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha |00_C\rangle |0_M\rangle + \alpha |01_C\rangle |1_M\rangle \\ &+ \beta |10_C\rangle |0_M\rangle + \beta |11_C\rangle |1_M\rangle), \end{aligned}$$

A primeira operação que Cebolinha faz é aplicar a uma unitária, conhecida como CNOT, que na base computacional,  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  é dado por

$$\text{CNOT} = |0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes X,$$

em que  $X$  nada mais é do que a matrix de Pauli  $\sigma_x$ , e é tal que

$$\begin{aligned} X |0\rangle &= |1\rangle, \\ X |1\rangle &= |0\rangle, \end{aligned}$$

levando-nos ao seguinte estado

$$\begin{aligned} (\text{CNOT} \otimes I) |\Psi_{in}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha |00_C\rangle |0_M\rangle + \alpha |01_C\rangle |1_M\rangle \\ &+ \beta |11_C\rangle |0_M\rangle + \beta |10_C\rangle |1_M\rangle), \end{aligned}$$

Em seguida Cebolinha aplica uma segunda unitária, mas agora somente em  $|\psi\rangle$ , conhecida como Hadamard,  $H$  que atua da seguinte maneira

$$\begin{aligned} H |0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle), \\ H |1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle), \end{aligned}$$

então

$$\begin{aligned} (H \otimes I \otimes I) (\text{CNOT} \otimes I) |\Psi_{in}\rangle &= \frac{1}{2} [\alpha (|0\rangle + |1\rangle) |0_C\rangle |0_M\rangle + \alpha (|0\rangle + |1\rangle) |1_C\rangle |1_M\rangle \\ &+ \beta (|0\rangle - |1\rangle) |1_C\rangle |0_M\rangle + \beta (|0\rangle - |1\rangle) |0_C\rangle |1_M\rangle]. \end{aligned}$$

O estado final acima, que denotamos agora por  $|\Psi_{fin}\rangle$  pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} |\Psi_{fin}\rangle &= \frac{1}{2} [|00_C\rangle (\alpha |0_M\rangle + \beta |1_M\rangle) + |01_C\rangle (\alpha |1_M\rangle + \beta |0_M\rangle) \\ &+ |10_C\rangle (\alpha |0_M\rangle - \beta |1_M\rangle) + |11_C\rangle (\alpha |1_M\rangle - \beta |0_M\rangle)]. \end{aligned} \quad (34)$$

Mas, das matrizes de Pauli sabemos que

$$\begin{aligned} X |\psi\rangle &= \alpha |1\rangle + \beta |0\rangle, \\ Y |\psi\rangle &= -i\alpha |1\rangle + i\beta |0\rangle, \\ Z |\psi\rangle &= \alpha |0\rangle - \beta |1\rangle, \end{aligned}$$

e portanto (34) pode ser escrito como

$$|\Psi_{fin}\rangle = \frac{1}{2} [|00_C\rangle |\psi\rangle + |01_C\rangle (X |\psi\rangle) + |10_C\rangle (Z |\psi\rangle) + |11_C\rangle (iY |\psi\rangle)].$$

Portanto, para que Cebolinha forneça o mesmo estado para Mônica basta que ele faça duas medidas, uma associada ao qubit que ele recebeu do Cascão e outra que ele já possuía acesso. Por exemplo, se o Cebolinha tiver como resposta  $|01_C\rangle$  basta ele enviar dois bits de informação, via canal clássico, para a Mônica que ela sabe, conforme um protocolo por eles estabelecidos inicialmente, que deverá apenas realizar uma única operação unitária, no caso o próprio  $X$ , para que ela acesse o estado  $|\psi\rangle$ , uma vez que  $X(X|\psi\rangle) = X^2|\psi\rangle = |\psi\rangle$ . Sendo assim, Mônica com apenas dois bits consegue recuperar toda a informação, que a princípio está associada a uma quantidade classicamente infinita, pois  $\alpha$  e  $\beta \in \mathbb{C}$ .

Deve-se tomar cuidado para não confundirmos um teleporte com uma clonagem quântica, uma vez que Cebolinha, após a interagir seu estado com o estado dado por Cascão perde completamente o acesso a informação de  $|\psi\rangle$ , que esta agora com a Mônica. Uma unitária que age em  $\mathcal{H}_n \otimes \mathcal{H}_n$  é chamada de máquina de cópia quântica, que nos leva a uma clonagem quântica, se para qualquer estado  $|x\rangle \in \mathcal{H}_n$ ,

$$U(|x\rangle |a_1\rangle) = |x\rangle |x\rangle.$$

Entretanto, tal máquina não existe.

- **Teorema da não clonagem quântica:** Para  $n > 1$ , onde  $n$  é a dimensão do espaço de Hilbert, não há nenhuma máquina de cópia quântica.

**Demonstração:** Assuma que uma máquina de cópia quântica exista, mesmo se  $n > 1$ . Sendo assim, para dois estados ortogonais  $|a_1\rangle$  e  $|a_2\rangle$  devemos ter

$$\begin{aligned} U(|a_1\rangle |a_1\rangle) &= |a_1\rangle |a_1\rangle, \\ U(|a_2\rangle |a_1\rangle) &= |a_2\rangle |a_2\rangle, \end{aligned} \quad (35)$$

assim como

$$\begin{aligned} U\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|a_1\rangle + |a_2\rangle) |a_1\rangle\right) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|a_1\rangle + |a_2\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}}(|a_1\rangle + |a_2\rangle), \\ &= \frac{1}{2}(|a_1\rangle |a_1\rangle + |a_1\rangle |a_2\rangle + |a_2\rangle |a_1\rangle + |a_2\rangle |a_2\rangle). \end{aligned} \quad (36)$$

Entretanto, pela linearidade de  $U$ , temos que

$$U\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|a_1\rangle + |a_2\rangle) |a_1\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}U(|a_1\rangle |a_1\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}}U(|a_2\rangle |a_1\rangle),$$

e agora pelo que sabemos de (35)

$$U\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|a_1\rangle + |a_2\rangle) |a_1\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}|a_1\rangle |a_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|a_2\rangle |a_2\rangle,$$

que é claramente diferente do que esperávamos em (36). Portanto, devido a linearidade de  $U$  tal máquina não existe.

## 6 Critério de separabilidade e medidas de emanhamento

Separabilidade é definido via a existência de uma decomposição de um estado em produtos de estados, no caso de estados puros, ou em uma soma convexa de produtos tensoriais para estados mistos. Desta forma, com o objetivo de mostrar que um dado estado é separável, temos que procurar por tal decomposição. Uma vez encontrada tal decomposição sabemos que o estado é separável. Entretanto, pode existir dois diferentes motivos na falha de encontra-lá: o estado é emanhado, e não há nenhuma decomposição em produto de estados, ou os estados são de fato separáveis, mas a decomposição apropriada não pode ser identificada.

Por essa razão há uma necessidade de um potencial critério para distinguir estados separáveis de estados emanhados que não exigem uma pesquisa explícita. Para estados puros há critérios que discriminam estados separáveis de estados emanhados sem ambiguidades, mas para estados mistos ferramentas similares só são possíveis para baixas dimensionalidades.

Veremos ao longo desta seção as principais técnicas para detectarmos estados emanhados, tanto para os casos puros como para casos de mistura estatística.

### 6.1 Estados puros

Vamos considerar o seguinte exemplo,

$$|\psi\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0\rangle + 2|1\rangle}{\sqrt{5}}, \quad (37)$$

este estado que é obviamente separável pode ser reescrito como

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}} [|00\rangle + 2|01\rangle + |10\rangle + 2|11\rangle],$$

em que o critério de separabilidade é menos evidente. Isto nos deixa claro que o critério de separabilidade é identificado mais facilmente se  $|\psi\rangle$  é expresso em termos da bases

$$\left\{ \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right\},$$

de  $\mathcal{H}_1$  e

$$\left\{ \frac{|0\rangle + 2|1\rangle}{\sqrt{5}}, \frac{2|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{5}} \right\},$$

de  $\mathcal{H}_2$  do que em termos das bases  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  para ambos. Então, como veremos, a observação é genérica, no sentido que há sempre uma base que nos revela a existência de propriedades de emanhamento. A representação de um estado nessas bases é chamada de **decomposição de Schmidt**.

#### 6.1.1 Decomposição de Schmidt

Conforme dito anteriormente, uma ferramenta extremamente útil para a verificação de estados emanhados para sistemas bipartidos é a decomposição de Schmidt que iremos apresentar agora,

- **Teorema 6.1: (decomposição de Schmidt)** Suponha que tenhamos um estado  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . Existe uma base ortonormal  $\{|\varphi_i^S\rangle\} \in \mathcal{H}_1$  e  $\{|\phi_i^S\rangle\} \in \mathcal{H}_2$  tais que

$$|\psi\rangle = \sum_i \sqrt{\lambda_i} |\varphi_i^S\rangle \otimes |\phi_i^S\rangle, \quad (38)$$

sendo  $\lambda_i$  números não negativos reais satisfazendo  $\sum_i \lambda_i = 1$  conhecidos como coeficiente de Schmidt.

Para chegarmos nessa forma tomemos duas bases locais arbitrárias

$$\{|\varphi_i\rangle\}; \{|\phi_i\rangle\},$$

nos espaços  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$  respectivamente, qualquer estado puro  $|\psi\rangle$  em  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  pode ser expresso em termos da correspondente base produto,

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} d_{ij} |\varphi_i\rangle \otimes |\phi_j\rangle. \quad (39)$$

Os coeficientes de expansão  $d_{ij}$  são dados em termos da sobreposição dos estados com dos vetores de base,

$$d_{ij} = \langle \varphi_i | \otimes \langle \phi_j | \psi \rangle.$$

Vamos agora fazer uma mudança de base,

$$|\tilde{\varphi}_i\rangle = U |\varphi_i\rangle; \quad |\tilde{\phi}_i\rangle = V |\phi_i\rangle,$$

onde  $U$  e  $V$  são transformações unitárias arbitrárias em  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$  respectivamente. Sendo assim, os coeficientes  $d_{ij}$  em termos dessas transformações são dadas por

$$\begin{aligned} \tilde{d}_{ij} &= \langle \tilde{\varphi}_i | \otimes \langle \tilde{\phi}_j | \psi \rangle, \\ &= \langle \varphi_i | U^\dagger \otimes \langle \phi_j | V^\dagger | \psi \rangle, \\ &= \sum_{p,q} \langle \varphi_i | U^\dagger | \varphi_p \rangle \langle \phi_j | V^\dagger | \phi_q \rangle \langle \varphi_p | \otimes \langle \phi_q | \psi \rangle, \\ &= \sum_{p,q} u_{ip} d_{pq} v_{qj} = [udv]_{ij}, \end{aligned}$$

onde utilizamos  $\sum_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| = \hat{1}$ ,  $\sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| = \hat{1}$  e definimos os elementos das matrizes unitárias sendo

$$\begin{aligned} u_{ip} &= \langle \varphi_i | U^\dagger | \varphi_p \rangle, \\ v_{qj} &= \langle \phi_j | V^\dagger | \phi_q \rangle. \end{aligned}$$

Nessa nova base o vetor de estado que descreve nosso sistema é dado por

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} [udv]_{ij} |\tilde{\varphi}_i\rangle \otimes |\tilde{\phi}_j\rangle. \quad (40)$$

Com o objetivo de obtermos a decomposição de Schmidt de  $|\psi\rangle$  nós usamos o fato que para toda matriz complexa  $d$  sempre existe uma transformação unitária  $U$  e  $V$  tal que  $udv$  é diagonal. Isto nos fornece uma decomposição singular de  $d$  com entradas diagonais não negativas reais chamadas **valores singulares**. Portanto, para cada estado  $|\psi\rangle$  podemos sempre achar bases locais  $|\varphi_i^S\rangle$  e  $|\phi_i^S\rangle$  em termos das quais a Eq.(40) se reduz a Eq.(38), onde sua soma é limitada pela dimensão do menor subsistema. Da mesma que os autovalores de uma matriz, os valores singulares são definidos unicamente. Sendo assim, para qualquer estado  $|\psi\rangle$  os coeficientes de Schimidt são unicamente determinados. Além disso, uma vez que as bases de Schmidt

$$\{|\varphi_i^S\rangle \otimes |\phi_i^S\rangle\},$$

são dadas por estados separáveis toda informação do emanhamento de um estado está codificado nos coeficientes de Schmidt. Muitas vezes ao escrevermos  $|\psi\rangle$  ao invés de escrevermos seus coeficientes como  $\lambda_i$  usaremos  $p_i$ , pois de fatos são as probabilidades associadas as populações da matriz densidade.

Antes de usarmos a decomposição de Schmidt para critério de separabilidade vamos dar um exemplo de seu uso para outros fins.

- Exemplo: Suponha que temos dois estados  $|\psi\rangle_{AB}$  e  $|\varphi\rangle_{AB}$  tais que  $\psi_A = \varphi_A$ , em que  $\psi_{AB}$  e  $\varphi_{AB}$  representam a matriz densidade dos dois estados  $|\psi\rangle_{AB}$  e  $|\varphi\rangle_{AB}$  respectivamente. Então existe uma transformação unitária  $U$  agindo sobre  $B$  tal que

$$(I \otimes U) |\varphi\rangle_{AB} = |\psi\rangle_{AB}.$$

Vamos a prova deste fato. Usando-se o fato da decomposição de Schmidt, podemos escrever existe uma base no sistema  $AB$  tal que

$$|\varphi\rangle_{AB} = \sum_i \sqrt{p_i} |e_i^A\rangle |e_i^B\rangle,$$

onde  $\sum_i p_i = 1$  e  $|e_i^A\rangle$   $|e_i^B\rangle$  são vetores ortonormais em  $A$  em  $B$  respectivamente.



Seja agora o estado  $|\psi\rangle_{AB}$ . Sabemos que também existe uma decomposição de Schmidt para este estado,

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_i \sqrt{q_i} |f_i^A\rangle |f_i^B\rangle,$$

onde  $\sum_i q_i = 1$  e  $|f_i^A\rangle |f_i^B\rangle$ . Vamos agora escrever a matriz densidade  $\varphi_{AB}$  e tomarmos o traço parcial sobre  $B$

$$\begin{aligned} \varphi_A &= \sum_{i,k} \sqrt{p_i p_k} |e_i^A\rangle \langle e_k^A| \text{Tr} [|e_i^B\rangle \langle e_k^B|], \\ &= \sum_i p_i |e_i^A\rangle \langle e_i^A|. \end{aligned}$$

Fazendo-se o mesmo em  $\psi_{AB}$

$$\psi_A = \sum_i q_i |f_i^A\rangle \langle f_i^A|.$$

Usando-se a igualdade  $\psi_A = \varphi_A$  e pelo nosso conhecimento prévio de que os coeficientes de Schmidt são unicamente determinados, temos seus autovalores iguais  $p_i = q_i$  e da mesma forma seus autovetores. Sendo assim podemos escrever,

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_i \sqrt{p_i} |e_i^A\rangle |f_i^B\rangle.$$

Como  $|e_i^B\rangle$  e  $|f_i^B\rangle$  são bases em  $B$  sabemos que existe uma transformação unitária tal que  $U : |e_i^B\rangle \rightarrow |f_i^B\rangle$  o que demonstra o enunciado acima.

Voltando tópico de critério de separabilidade, no caso em que há somente um coeficiente de Schmidt, então  $|\psi\rangle$  é separável. Retornemos ao exemplo em que o estado é dado por (33), tomando-se  $|\varphi_1^S\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ ,  $|\varphi_2^S\rangle = (|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$ ,  $|\phi_1^S\rangle = (|0\rangle + 2|1\rangle)/\sqrt{5}$  e  $|\phi_2^S\rangle = (2|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{5}$  vemos que temos como coeficientes de Schmidt  $\lambda = \{0, 1\}$  e de fato temos um estado separável. Caso contrário, se tivermos mais do que um coeficiente de Schmidt não nulo, não é possível expressar o estado na forma da Eq.(27). Podemos ver facilmente isso para  $|\psi\rangle = 1/\sqrt{2}(|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|1\rangle)$  temos que as bases de Schmidt são dadas por  $\{|0\rangle|0\rangle, |1\rangle|1\rangle\}$  e  $\lambda = \{1/2, 1/2\}$ .

Portanto, podemos concluir que um estado puro  $|\psi\rangle$  é separável se, e somente se ele tem somente um valor do coeficiente de Schmidt não nulo.

### 6.1.2 Matriz densidade reduzida

Uma vez que os coeficientes de Schmidt são úteis para distinção entre estados separáveis e emaranhados, devemos focar em como calculá-los. Matrizes densidade reduzida são particularmente úteis nesse contexto. Como vimos anteriormente, para acessarmos o primeiro subsistema tomamos o traço parcial sobre o segundo, em termos da decomposição de Schmidt (38)

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= \text{Tr}_2 |\psi\rangle \langle \psi|, \\ &= \text{Tr}_2 \left[ \sum_{i,j} \sqrt{\lambda_i \lambda_j} |\varphi_i^S\rangle \langle \varphi_j^S| \otimes |\phi_i^S\rangle \langle \phi_j^S| \right], \\ &= \sum_i \lambda_i |\varphi_i^S\rangle \langle \varphi_i^S|. \end{aligned} \tag{41}$$

Vimos que os coeficientes de Schmidt são dados pelos autovalores da matriz densidade reduzida  $\sigma_1$ . O mesmo ocorre no caso da matriz densidade reduzida do segundo subsistema  $\sigma_2 = \text{Tr}_1 |\psi\rangle \langle \psi|$ , isto é ambas matrizes reduzidas possuem os mesmos autovalores não nulos e os vetores de base das bases de Schmidt são dadas pelos autoestados de  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$ .

Uma vez que a separabilidade exige que exatamente um coeficiente de Schmidt seja diferente de zero, nós também relacionamos o estado emaranhado de um estado puro,  $|\psi\rangle$ , com o grau de mistura da matriz densidade reduzida. Isto é, podemos reescrever o critério de separabilidade para estados puros:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \sigma_r &= 1 \quad \implies \sigma_r \text{ é puro} \quad \implies |\psi\rangle \text{ é separável.} \\ \text{Tr} \sigma_r^2 &< 1 \quad \implies \sigma_r \text{ é mistura} \quad \implies |\psi\rangle \text{ é emaranhado,} \end{aligned}$$

com  $r$  referindo-se a um dos dois subsistemas.

Conclui-se então que para casos puros a decomposição de Schmidt fornece um critério necessário e suficiente para separabilidade. Infelizmente, para estados mistos tal decomposição elegante não existe. Em particular, se um estado é misto, o grau de mistura de sua matriz densidade reduzida não é um indicador de emanhamento. Portanto, precisamos encontrar um novo critério para distinguir emanhamento de estados de mistura separáveis. Mostraremos aqui duas importantes ferramentas para essa finalidade, testemunha de emanhamento e mapas positivos.

## 6.2 Entropia de emanhamento

Uma das maneiras mais simples de medirmos o emanhamento é através da **entropia de Von Neumann**, que é dada pela seguinte expressão em termos do operador densidade,  $\rho$

$$S(\rho) = -\text{Tr}[\rho \ln(\rho)]. \quad (42)$$

Embora esse expressão seja bem geral, no sentido que pode ser utilizada para diversos sistemas quânticos sem nenhuma analogia com a entropia definida para sistemas clássicos, ela possui uma intuição puramente física no caso em que pensamos em fluidos clássicos. Para vermos essa construção faremos uma breve revisão da termodinâmica e caso o leitor queira se aprofundar um pouco mais pode olhar a referência [5].

### 6.2.1 Entropia

Vamos iniciar essa revisão partindo-se do teorema de Clausius

$$\oint_C \frac{d'Q}{T} = 0,$$

sendo  $C$  caminhos que nos fornecem processos reversíveis e  $Q$  sendo a troca de calor associado nesse processo, onde usamos  $d'$  para indicarmos que essa diferencial é inexata<sup>2</sup>. Essa equação nos diz que no final desse ciclo a quantidade de calor perdida e ganha são iguais. Sendo assim, partindo-se desse resultado podemos escrever a seguinte integral que dependo só de dois estados, inicial  $i$  e final  $f$  que estejam em equilíbrio termodinâmico dado por

$$\int_i^f \frac{d'Q_R}{T},$$

em que o subíndice  $R$  vem do fato do processo ser reversível. Clausius então definiu uma nova função de estado dada por  $S$ , que depende do estado inicial e final do sistema, que foi denominada por entropia,

$$S_i - S_f = \int_i^f \frac{d'Q_R}{T}, \quad (43)$$

que possui a unidade de Joule por Kelvin. Notemos aqui que dada uma escolha arbitrária do estado padrão  $i$  isto corresponde apenas a uma constante aditiva arbitrária.

Dizer que  $S$  é uma função corresponde a dizer que essa função é definida sobre um par qualquer das variáveis pressão,  $P$  volume  $V$  ou temperatura  $T$ , ou seja

$$S = S(P, V); S = S(P, T); S = S(V, T).$$

Se tomarmos  $\Delta S = S_f - S_i$  como sendo uma variação infinitesimal, a Eq.(43) toma a seguinte forma

$$dS = \frac{d'Q_R}{T}, \quad (44)$$

<sup>2</sup> Exemplos de diferenciais inexatas são  $ydx$  e  $xdy$ . Nesse caso, quando essas quantidade são somadas, levam-nos a uma diferencial exata,

$$ydx + xdy = d(xy + \text{constante}).$$

que é a expressão da segunda lei da termodinâmica na forma diferencial, assim como a primeira lei na forma infinitesimal é dada por

$$dU = d'Q - d'W, \quad (45)$$

em que novamente temos  $d'$  para dizer que a diferencial é inexata. Em particular, quando temos uma transformação reversível num fluido

$$d'W_R = PdV,$$

levando-nos a

$$d'Q_R = dU + PdV. \quad (46)$$

Vamos olhar um caso particular que será de nosso interesse futuramente: **entropia de uma gás ideal**. Nesse caso iremos calcular a entropia molar, ou seja, a entropia por mol que indicaremos por  $s$ . Usando-se o resultado (46) em (44) temos que

$$ds = \frac{dU}{T} + \frac{PdV}{T}, \quad (47)$$

que é uma expressão válida para qualquer fluido. Agora, é sabido que para um mol de gás ideal tem-se

$$dU = C_V(T) dT, \quad (48)$$

em que  $C_V$  é a capacidade térmica molar a volume constante. Tem-se ainda que para um gás ideal a equação de estado é dada por

$$PV = RT, \quad (49)$$

com  $R$  constante universal dos gases perfeitos.

Vamos explorar o caso em que a entropia é uma função de estado em termos de  $V$  e  $T$ . Nesse caso, usaremos a Eq.(49) junto com (48) em (47), levando-nos a expressão

$$ds = \frac{C_V(T) dT}{T} + R \frac{dV}{V},$$

que é uma forma diferencial exata, levando-nos a

$$s_f - s_i = \int_{T_i}^{T_f} \frac{C_V(T)}{T} dT + R \int_{V_i}^{V_f} \frac{dV}{V}.$$

Essa expressão quando consideramos  $C_V$  constante entre o intervalo  $(T_i, T_f)$  fica

$$s_f - s_i = C_V \ln \left( \frac{T_f}{T_i} \right) + R \ln \left( \frac{V_f}{V_i} \right),$$

ou seja,

$$s(V, T) = C_V \ln T + R \ln V + \text{constante}. \quad (50)$$

No caso em que temos  $n$  moles de gás,

$$S(V, T) = ns(V, T),$$

mostrando-nos a natureza extensiva da entropia, ou seja, uma grandexa que depende da massa do sistema.

Vamos agora nos atentar ao caso em que queremos saber a variação de entropia de processos irreversíveis, que vão do estado inicial  $i$  até o final  $f$ . Para isso é preciso imaginarmos um processo reversível que vá igualmente de  $i$  até  $f$ . Embora a variação do sistema ao passar de um dado estado inicial até um final seja a mesma em processos reversíveis e irreversíveis a diferença se dá para a vizinhança do sistema.

Um caso de particular interesse para nós é o caso de uma **expansão livre de um gás**. Neste caso temos um gás que passa de um volume inicial  $V_i$  até um volume final  $V_f$  onde  $V_f > V_i$ . Durante este processo não há realização de trabalho externo ( $\Delta W = 0$ ) e não há troca de calor, uma vez que a experiência é realizada num recipiente de paredes adiabáticas ( $\Delta Q = 0$ ), de modo que  $\Delta U = 0$ .

Sendo assim, olhando-se para essas considerações no caso de uma expansão livre infinitésima, tem-se  $d'W = d'Q = 0$  levando-nos a

$$dU = d'Q - d'W = 0.$$

Aqui já podemos notar a diferença de quando temos processos reversíveis e irreversíveis, pois embora tenhamos  $PdV > 0$ , e então  $d'W_R = PdV$ , aqui  $d'W = 0$ .

Conforme dito anteriormente, para calcularmos  $\Delta S$  temos que imaginar uma expansão reversível de  $V_i$  até  $V_f$ , na qual  $\Delta U = 0$ . Neste caso, analisando-se o caso de um gás ideal (48) isto equivale a dizer que  $\Delta T = 0$ , de modo que a expansão reversível seja isotérmica. Sendo assim a Eq.(50) para  $n$  mols para uma expansão livre fica

$$\Delta S = S_f - S_i = nR \ln \left( \frac{V_f}{V_i} \right) > 0. \quad (51)$$

Por (44) podemos notar que  $d'Q_R = TdS > 0$  para processos reversíveis enquanto que para expansão livre  $d'Q = 0$ , mostrando-nos novamente a diferença em ambos processos.

Continuando nesta mesma linha de análise vamos olhar o processo de difusão de um gás em outro. Para isto vamos pensar num exemplo bem simples que é quando destampamos um frasco de perfume. É fácil notar que o cheiro se espalha rapidamente pelo ambiente, e portanto suas moléculas. Neste caso temos claramente um processo irreversível, ou seja, o gás não volta espontaneamente ao frasco. Embora tenhamos um processo de expansão de um gás, ele se difunde pela atmosfera, e não no vácuo conforme vimos para a expansão livre.

No caso em que tivermos por exemplo dois gases  $A$  e  $B$  cada um contendo  $n$  moles e ocupando um volume  $V$  separados por um diafragma, conforme a Fig.(1).

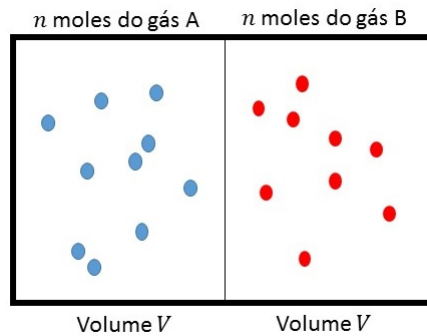


Fig. 1: Moléculas de gás inicialmente separadas por um diafragma, ambas ocupando o mesmo volume  $V$ .

Se num dado instante de tempo  $t$  perfurarmos esta parede que os separa, um gás se difundirá pelo outro até que tenhamos uma mistura homogênea dos dois gases ocupando todo o volume disponível, no caso  $2V$ . Neste caso pensar nesse processo como sendo uma expansão livre do gás  $A$  de  $V$  até  $2V$  e igualmente para o gás  $B$ . Neste caso em particular a variação de entropia é dada por

$$\Delta S = \Delta S_A + \Delta S_B = 2nR \ln 2,$$

utilizando-se (51). É interessante frizarmos que na teoria cinética dos gases, em que temos uma mistura de gases ideais, cada um se comporta como se ocupasse sozinho o volume ocupado pela mistura, justificando-se a analogia que fizemos com a expansão livre.

Tendo em vista tudo o que foi dito, vamos analisar o caso em que queremos saber a entropia de  $k$  gases distintos separados em compartimentos de volume  $V_i$  e sendo o volume total  $V$ . Sendo assim se quisermos saber qual a probabilidade de encontrarmos um gás  $i$  no compartimento de volume  $V$ , basta tomarmos

$$p_i = \frac{V_i}{V}. \quad (52)$$

Ao invés de pensarmos em termos de moles, vamos pensar no número total de moléculas  $N_i$ . Logo, a constante universal dos gases  $R$  é escrita em termos da constante de Avogadro  $N$  que é definida como sendo o número de partículas constituintes (normalmente átomos ou moléculas) por mol de uma determinada substância e pela constante de Boltzmann  $k$ ,  $R = Nk$ . Vamos ainda adotar as unidades naturais, e portanto  $k = 1$ .

Tendo no compartimento total  $N$  moléculas, podemos escrever a quantidade de moléculas  $N_i$  termos do número total  $N$ ,  $N_i = p_i N$ . Sendo assim, a variação da entropia que um gás com  $N_i$  moléculas, partindo-se de um volume  $V_i$  se expanda por toda caixa é dada por

$$\Delta S_i = -N_i \ln \left( \frac{V_i}{V} \right) = -N p_i \ln(p_i),$$

onde o sinal negativo veio devido a inversão da fração  $V_i/V$  acima. Portanto se num dado instante de tempo furarmos todos os disframas que separam os  $k$  gases a entropia total por molécula de gás, que também chamaremos de  $s$  e ainda quando tomamos  $s_i = 0$  é

$$s = \frac{S}{N} = - \sum_i p_i \ln(p_i) = -\text{Tr}[\rho \ln(\rho)]. \quad (53)$$

Portanto vemos que a entropia de Von Neumann possui uma intuição física clara.

Para a entropia de emanhamento, a entropia de Von Neumann será expressa com o logaritmo na base dois

$$S(\rho) = -\text{Tr}[\rho \log_2(\rho)].$$

### 6.2.2 Entropia de Von Neumann

Vamos agora ver valores diferentes de entropia relacionados a diferentes estados quânticos.

É fácil ver que para estados puros, como  $|\psi\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ , onde podemos sempre fazermos uma mudança adequada de base, tal que

$$\rho = V |\psi\rangle \langle \psi| V^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

a entropia é mínima

$$S(\rho) = 1 \log_2(1) + 0 \log_2(0) = 0.$$

Já para casos de estados completamente mistos a entropia é máxima,

$$S\left(\frac{1}{d}\right) = -\frac{1}{d} \text{Tr} \left[ \log_2 \frac{1}{d} I_{d \times d} \right] = \log_2 d,$$

onde  $d$  é a dimensão do espaço de Hilbert.

A entropia de emanhamento é definido para casos puros bipartidos, dois subsistemas. Seja  $\rho$  a matriz densidade para um caso puro, com  $\rho_1 = \text{Tr}_2 \rho$  e  $\rho_2 = \text{Tr}_1 \rho$ , temos que

$$S(\rho_1) = S(\rho_2),$$

igualdade essa que fica fácil de ver quando usamos a decomposição de Schmidt Eq.41. Vemos que para o caso puro  $|\psi\rangle = |00\rangle$ , temos  $S(\rho_1) = S(\rho_2) = 0$ . Já no caso de um estado maximalmente emanhado,  $|\psi\rangle = 1/\sqrt{2}(|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|1\rangle)$  os dois subsistemas se tornam completamente mistos,

$$\rho_1 = \rho_2 = \frac{1}{2} I_{2 \times 2}.$$

Portanto, a entropia de emanhamento de um estado maximalmente emanhado de 2-qubits é

$$S(\rho_1) = S(\rho_2) = \log_2 2 = 1.$$

### 6.3 Concorrência

Dado o estado para dois qubits,

$$|\psi\rangle = \alpha |00\rangle + \beta |01\rangle + \gamma |10\rangle + \delta |11\rangle,$$

a concorrência é definida como

$$C := 2|\alpha\delta - \beta\gamma| \geq 0.$$

seja,  $|\psi\rangle = |00\rangle$ , fica fácil ver que  $C(\psi) = 0$ . Enquanto que para  $|\phi\rangle = 1/\sqrt{2}(|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|1\rangle)$ ,  $C(\phi) = 1$ , onde atinge seu valor máximo. Similarmente, seja o estado,

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{2} (|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle),$$

novamente temos  $C(\psi_1) = 0$ . Vamos, agora aplicar a seguinte unitária sobre este estado,

$$V = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \frac{\varphi}{2} & -\sin \frac{\varphi}{2} \\ 0 & 0 & \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}.$$

Vemos que

$$\begin{aligned} |\psi_2\rangle &= V|\psi_1\rangle, \\ &= |00\rangle + |01\rangle + \left(\cos \frac{\varphi}{2} - \sin \frac{\varphi}{2}\right) |10\rangle + \left(\cos \frac{\varphi}{2} + \sin \frac{\varphi}{2}\right) |11\rangle. \end{aligned}$$

Este estado corresponde a uma pré-medida na teoria de processos de medidas quânticas, que leva ao emanhamento entre o sistema e o aparato de medida físico. Neste caso, temos

$$C(\psi_2) = \sin \frac{\varphi}{2}.$$

Portanto temos o máximo quando  $\varphi = \pi$  e o mínimos quando  $\varphi = 0$  ou  $\varphi = 2\pi$ . A partir desse estado, podemos também medir a entropia de emanhamento. O operador densidade neste caso é

$$\begin{aligned} \rho_2 &= |\psi_2\rangle\langle\psi_2|, \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & - & - \\ 1 & 1 & + & + \\ - & - & 1 - \sin \varphi & \cos \frac{\varphi}{4} \\ + & + & \cos \frac{\varphi}{4} & 1 + \sin \varphi \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

onde,

$$\pm = \cos \frac{\varphi}{2} \pm \sin \frac{\varphi}{2}.$$

Para os subsistemas  $A$  e  $B$  de  $\rho_2$ , temos que

$$\begin{aligned} \rho_A &= \text{Tr}_B \rho_2, \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \cos \frac{\varphi}{2} \\ \cos \frac{\varphi}{2} & 1 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \rho_B &= \text{Tr}_A \rho_2, \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{2} \sin \varphi & \cos^2 \frac{\varphi}{2} \\ \cos^2 \frac{\varphi}{2} & 1 + \frac{1}{2} \sin \varphi \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

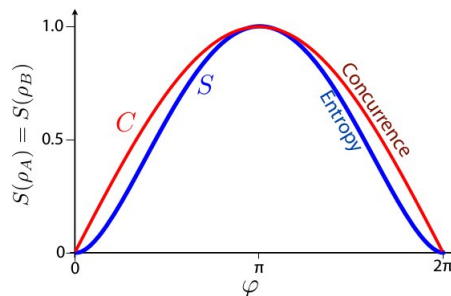


Fig. 2: Entropia de emanhamento de concorrência de  $\rho_2$ .

Na Fig.(2) podemos ver a dependência de  $S(\rho_A) = S(\rho_B)$  em termos de  $\varphi$ . Vemos claramente que a concorrência difere de  $C(\psi_2)$ , entretanto ambas medidas de emaranhamento possuem o mesmo máximo e assumem o valor nulo quando representam estados separáveis.

Para matrizes densidade, a concorrência é definida como

$$C(\rho) = \max(0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4),$$

onde  $\lambda_i$  são os autovalores, em ordem decrescente, do operador Hermitiano

$$R = \sqrt{\sqrt{\rho}\tilde{\rho}\sqrt{\rho}},$$

e

$$\tilde{\rho} = (\sigma_y \otimes \sigma_x) \rho^* (\sigma_y \otimes \sigma_x),$$

em que  $\rho^*$  é o conjugado complexo de  $\rho$ .

## 6.4 Traço parcial positivo (TPP)

O traço parcial positivo foi introduzido como uma condição necessária para que a matriz densidade  $\rho$  dos dois sistemas quânticos  $A$  e  $B$ , sejam separáveis. Como essa construção foi formulada para operadores densidade, é portanto aplicados para estados mistos.

No caso em que ambos os sistemas são descritos por qubits, vamos escrever os estados de base do qubit  $A$  como  $|i\rangle$  e  $|j\rangle$  e para os qubits  $B$  como  $|l\rangle$  e  $|k\rangle$ . O operador densidade para o sistema completo pode ser escrito como

$$\rho = \sum_{i,j,k,l} p_{ijkl} |i\rangle \langle j| \otimes |k\rangle \langle l|.$$

O traço parcial em relação a um dos qubits é obtido simplesmente trocando os correspondentes bras e kets, no caso do qubit  $B$ ,

$$(|k\rangle \langle l|)^T = |l\rangle \langle k|.$$

Aplicando-se essa transformação ao operador densidade acima, temos

$$\rho^{TB} = (1 \otimes T) \rho = \sum_{i,j,k,l} p_{ijkl} |i\rangle \langle j| \otimes |l\rangle \langle k|.$$

O critério TPP diz afirma que se  $\rho^{TB}$  possui um auto valor negativo, então  $\rho$  está emaranhado, lembrando que  $\rho$  é um operador positivo definido, conforme visto em (16) e portanto possui apenas autovalores positivos. Embora, a prova não seja trivial é fácil de ver que para estados separáveis os autovalores do traço parcial são positivos. No caso em que o estado é separável, podemos escrevê-lo como

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i^A \otimes \rho_i^B.$$

Os operadores densidade  $\rho_i^{A,B}$  agem sobre espaços de Hilbert de individuais qubits. Caso tomemos o traço parcial de um deles, seus autovalores, que devem ser todos positivos ou zero, não mudam e portanto os autovalores do estado produto também deve ser positivo ou zero. Vamos a um exemplo concreto.

No caso em que temos

$$\sigma = |00\rangle \langle 00| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

é fácil de ver que o traço parcial deixa o sistema invariante  $\sigma^{TB} = \sigma$  e que os autovalores são  $(1, 0, 0, 0)$ . Como nenhum dos autovalores é negativo, este estado é compatível com um estado produto.

Um segundo exemplo que podemos mostrar é um dos estados de Bell

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{1}{2} (|00\rangle + |11\rangle) ( \langle 00| + \langle 11| ), \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Podemos ver que a operação  $T_B$  não afeta os estados  $|00\rangle\langle 00|$  e  $|11\rangle\langle 11|$ , entretanto muda os demais

$$\begin{aligned} T_B : |00\rangle\langle 11| &\rightarrow |01\rangle\langle 10|, \\ T_B : |11\rangle\langle 00| &\rightarrow |10\rangle\langle 01|. \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \tau^{T_B} &= \frac{1}{2} (|00\rangle\langle 00| + |01\rangle\langle 10| + |10\rangle\langle 01| + |11\rangle\langle 11|), \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Os autovalores dessa matriz são  $\lambda = \pm 1/2$ , o que confirma que  $\tau$  é um estado emaranhado.

## References

- [1] Gennaro Auletta, Mauro Fortunato, and Giorgio Parisi. *Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 2014.
- [2] Andreas Buchleitner, Carlos Viviescas, and Markus Tiersch. *Entanglement and Decoherence*. Springer, 2009.
- [3] Claude Cohen-Tannoudji and Bernard Diu Franck Laloe. *Quantum Mechanics*, volume one. Hermann and John Wiley and Sons, 1977.
- [4] R. P. Feynman. *Statistical Mechanics*. The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc, 1988.
- [5] H. Moyses Nussenzveig. *Fluidos Oscilacoes e Ondas*. 1969.