

Capítulo 8

Preparação e determinação de estados

Como discutido em §2.5, para testar as previsões da mecânica quântica, precisamos de um *ensemble* infinito de sistemas identicamente preparados para submeter a procedimentos de medida e obter suas propriedades probabilísticas. Embora “infinito” seja ideal, diversos sistemas não ficam longe disto. Considere, por exemplo, um laser de comprimento de onda $\lambda = 600$ nm, com potência de 10 mW. Este é um estado de aproximadamente 10^{16} fótons de energia $E_{laser} = hc/\lambda = 2,06$ eV sendo emitidos por segundo. Se este laser incide em um cristal que tem um modo vibracional de 0,20 eV, dos fótons incidentes, existe a probabilidade de que um em cada 10^6 fótons sofra um espalhamento inelástico, perdendo energia na criação de um quantum de vibração da rede (fônon), saindo com energia $E_{Stokes} = (2,06 - 0,20)$ eV. Assim, teríamos da ordem de 10^{10} fótons de energia $E_{Stokes} = 1,86$ eV sendo emitidos pela amostra. A mecânica quântica poder ser aplicada aqui, seja nos fenômenos de emissão por um laser, seja na interação da luz com a matéria.

Voltando aos aspectos fundamentais da Mecânica Quântica vamos agora nos ater ao problema de preparação e determinação de estados que descrevem sistemas físicos. Dividimos o problema em duas perguntas:

Pergunta 1: Qual o procedimento para preparar um estado representado por um operador ρ específico?

O que vimos até agora é que o operador ρ satisfaz às propriedades (§2.2):

$$\text{Tr}(\rho) = 1, \quad \rho = \rho^\dagger, \quad \langle u|\rho|u\rangle. \quad (8.1)$$

Em outras palavras, o operador de estado, para um estado específico, não pode ser qualquer operador. Ele tem que ser hermitiano, positivo semi-definido e de traço igual a um. Sendo um operador auto-adjunto (hermitiano), vale a

representação espectral $\rho = \sum_n \rho_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$ e os seus autovalores ρ_n são reais e não-negativos ($0 \leq \rho_n \leq 1$).

Sabemos ainda que a equação de evolução do estado é:

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H(t), \rho(t)], \quad (8.2)$$

no cenário de Schrödinger (3.80) ou de Heisenberg (3.84). Se o estado for puro ($\rho = \rho^2$) temos (3.75):

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}H(t)|\psi(t)\rangle. \quad (8.3)$$

Outra pergunta relevante é:

Pergunta 2: Como determinar o operador de estado?

Neste sentido, sabemos que o valor esperado de observáveis físicos R são dados por (§3.7):

$$\langle R \rangle = \text{Tr} \{ \rho R \}, \quad (8.4)$$

onde $R = R^\dagger$. Para um estado puro temos

$$\langle R \rangle = \text{Tr} \{ |\psi\rangle\langle\psi| R \} = \langle\psi| R |\psi\rangle. \quad (8.5)$$

Estes são os aspectos teóricos da construção dos estados e dos observáveis físicos em Mecânica Quântica, respeitando os postulados, a álgebra linear e a teoria da probabilidade, nos quais devemos agora nos debruçar. Em outras palavras, essas duas perguntas estabelecem a parte principal deste capítulo, que consiste em resolver:

1. O problema da preparação de estados (pergunta 1);
2. O problema da determinação de estados (pergunta 2).

8.1 Preparação de estados

Genericamente, a forma mais simples de se preparar um estado é partindo de um estado puro conhecido no tempo inicial $t = t_0$ e, utilizando um operador evolução temporal $U(t, t_0)$, chegar a um estado qualquer $|\psi(t)\rangle$ em $t > t_0$, a partir de $|\psi(t_0)\rangle$. Já foi demonstrado por Reck *et al.* [?] que, para espaços de dimensão finita, é sempre possível construir um $U(t, t_0)$ para gerar um estado qualquer a partir de um estado puro conhecido.

Outro problema é como obter um estado desejado a partir de um estado inicial desconhecido, ou arbitrário. Consideremos um estado, na representação das coordenadas, descrito pela função de onda:

$$\psi(\mathbf{x}) = R(\mathbf{x})e^{iS(\mathbf{x})}, \quad (8.6)$$

com R e S sendo funções reais. O primeiro passo consiste em construir um potencial $W_1(\mathbf{x})$, tal que a solução do estado fundamental da equação de Schrödinger independente do tempo (no instante inicial) seja $\psi_0(\mathbf{x}) = R(\mathbf{x})$. Pela equação de Schrödinger independente do tempo pode-se demonstrar que o potencial que realiza tal preparação de estado é dado por:

$$W_1(\mathbf{x}) = E + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\nabla^2 R(\mathbf{x})}{R(\mathbf{x})}, \quad (8.7)$$

e o procedimento consiste em esperar até que a probabilidade do sistema decair para o estado fundamental seja suficientemente próxima de 1. Na sequência aplica-se um pulso de potencial:

$$W_2(\mathbf{x}, t) = -hS(\mathbf{x})\delta_\epsilon(t), \quad (8.8)$$

com $\delta_\epsilon = 1/\epsilon$ no intervalo $0 < t < \epsilon$ e zero fora deste intervalo. No limite $\epsilon \rightarrow 0$ a interação W_2 é mais forte que qualquer outra no sistema. Integrando a equação de Schrödinger dependente do tempo e considerando a condição inicial $\psi_0(\mathbf{x}) = R(\mathbf{x})$, encontramos $\psi(x, t + \epsilon) = R(\mathbf{x})e^{iS(\mathbf{x})}$, que é o estado desejado $\forall t > 0$.

Filtragem: Outro método de preparação de estados consiste na chamada filtragem. O princípio da filtragem pode ser exemplificado considerando a montagem de um aparato de Stern-Gerlach, tal que feixes de partículas com spins distintos sejam separados espacialmente devido à interação com o campo magnético inhomogêneo. Em seguida, bloqueamos os feixes que não são de interesse, eliminando-os para selecionar um estado de spin em particular.

Um processo similar de filtragem pode ser realizado para preparar um estado de luz polarizada, utilizando uma fonte de luz não polarizada e um polarizador.

Teorema da não-clonagem: Um procedimento comum de preparação de estados no mundo clássico que não é possível em mecânica quântica é o que podemos chamar de clonagem. Nos domínios da física clássica isso é comum: copiar um arquivo de computador, duplicar uma chave, etc. Surpreendentemente, a linearidade das equações quânticas de movimento tornam impossível a construção de um procedimento de duplicação de estados quânticos genéricos. Esse é o teorema da não-clonagem, discutido a seguir.

Considere um estado quântico $|\phi\rangle$ que desejamos clonar. Aplicamos um operador unitário de evolução de estado U em um dispositivo no estado $|\phi\rangle \otimes |\psi\rangle$, de tal forma que:

$$U|\phi\rangle \otimes |\psi\rangle = |\phi\rangle \otimes |\phi\rangle \otimes |\psi'\rangle. \quad (8.9)$$

Note que precisamos do estado inicial $|\psi\rangle$ de onde será tirado o necessário para a clonagem de $|\phi\rangle$, levando $|\psi\rangle$ em $|\psi'\rangle$, o segundo pertencendo a um espaço de dimensão menor que o primeiro. Provaremos que tal dispositivo não pode existir por contradição. Assumiremos que existem dois estados tal que a equação (8.9) seja válida:

$$U|\phi_1\rangle \otimes |\psi\rangle = |\phi_1\rangle \otimes |\phi_1\rangle \otimes |\psi'\rangle, \quad (8.10)$$

$$U|\phi_2\rangle \otimes |\psi\rangle = |\phi_2\rangle \otimes |\phi_2\rangle \otimes |\psi'\rangle. \quad (8.11)$$

Vamos aplicar este procedimento agora no estado superposto $|\phi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle)$. A natureza linear de U implica que obteremos:

$$U|\phi_s\rangle \otimes |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_1\rangle \otimes |\phi_1\rangle \otimes |\psi'\rangle + |\phi_2\rangle \otimes |\phi_2\rangle \otimes |\psi''\rangle), \quad (8.12)$$

que está em contradição com a equação (8.9), pois de acordo com esta última deveríamos obter:

$$U|\phi_s\rangle \otimes |\psi\rangle = |\phi_s\rangle \otimes |\phi_s\rangle \otimes |\psi'''\rangle. \quad (8.13)$$

Isso demonstra que é impossível construir tal dispositivo que sirva para clonar um estado quântico desconhecido, arbitrário.

O teorema da não clonagem poderia levar à impressão de que a mecânica quântica está em desacordo com os procedimentos e observações no domínio clássico, mas isto não é verdade. Note que fazendo o produto interno da equação (8.11) pela anterior, dos dois lados, obtemos

$$\begin{aligned} \langle\psi| \otimes \langle\phi_1| U^\dagger U |\phi_2\rangle \otimes |\psi\rangle &= \langle\psi'| \otimes \langle\phi_1| \otimes \langle\phi_1|\phi_2\rangle \otimes |\phi_2\rangle \otimes |\psi''\rangle \\ \langle\phi_1|\phi_2\rangle \langle\psi|\psi\rangle &= \langle\phi_1|\phi_2\rangle^2 \langle\psi'|\psi''\rangle. \end{aligned} \quad (8.14)$$

Esta igualdade só é válida se $\langle\phi_1|\phi_2\rangle = 0$. Efetivamente, podemos afirmar que estado clássicos (que permitem a clonagem) são sempre ortogonais, ou seja, que o teorema da clonagem não está em conflito com os resultados da mecânica clássica.

Por simplicidade, trabalhamos até aqui com a preparação de estados puros. A preparação de estados não puros consiste em construir combinações de

estados puros com pesos w_i , tal que possamos preparar um operador de estado $\rho = \sum_i w_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$. Tudo o que foi discutido nesta seção continua válido, não havendo adição de novos princípios, apenas um aumento da complexidade do tratamento do problema. De fato, a natureza geralmente nos fornece estados não puros, e para o desenvolvimento de tecnologias que utilizam as propriedades quânticas da natureza, o desafio é purificar estes estados.

8.2 Determinação de estados

Considere um estado representado por um operador de estados ρ . Quais procedimentos são necessários e suficientes para se determinar ρ completamente?

Uma medida em um estado de uma variável dinâmica, $R|r_n\rangle = r_n|r_n\rangle$, não fornece informação suficiente para a determinação do estado, significa apenas que o resultado obtido r_n é possível, isto é, nos diz que $|r_n\rangle$ é um estado possível do operador de estados desconhecido ρ . Diversas medidas de R em diversos estados preparados de forma idêntica poderiam levar a uma distribuição de probabilidade conhecida, $Prob(R = r_n|\rho) = \langle r_n|\rho|r_n\rangle$, que equivale à determinação dos elementos de matriz da diagonal de ρ na base dos autoestados de R . Mas não forneceria os elementos fora da diagonal e, portanto, não determina ρ integralmente.

Para medir elementos não-diagonais precisamos medir uma variável dinâmica (ou mais de uma) que não comute com R . Com isto garantimos estar acessando informação (autovalores e valores esperados) de ρ em uma base de autovetores que não é a mesma base do operador R , acessando, assim, os elementos fora da diagonal de ρ na base de R .

Para exemplificar, considere os dois operadores hermitianos abaixo:

$$A_{mn} = \frac{|r_m\rangle\langle r_n| + |r_n\rangle\langle r_m|}{2}, \quad B_{mn} = \frac{|r_m\rangle\langle r_n| - |r_n\rangle\langle r_m|}{2i}, \quad (8.15)$$

tal que:

$$\text{Tr}(\rho A_{mn}) = \text{Re}\{\langle r_m|\rho|r_n\rangle\}, \quad \text{Tr}(\rho B_{mn}) = -\text{Im}\{\langle r_m|\rho|r_n\rangle\}. \quad (8.16)$$

Os operadores A_{mn} e B_{mn} nos possibilita medir os elementos não-diagonais de ρ , obtendo todos os seus elementos de matriz. O que não está claro é se esses operadores são observáveis físicos e, se são, como implementar medidas apropriadas. Neste sentido vejamos alguns casos particulares onde a natureza das medidas que precisamos fazer é conhecida.

Estado de spin $s = 1/2$ Já mostramos (ver Eq.(7.38)) que o operador de estado geral para esse caso é:

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}), \quad (8.17)$$

que depende de três parâmetros reais: a_x , a_y e a_z , que têm que ser deduzidos de medidas apropriadas. A média da i -ésima componente do spin é dada por:

$$\langle S_i \rangle = \text{Tr} \left(\rho \frac{1}{2} \hbar a_i \right) = \frac{1}{2} \hbar a_i, \quad (8.18)$$

onde $i = x, y, z$. Para determinar o estado completamente, basta medir os três valores médios das três componentes do operador de spin e isso pode ser feito, por exemplo, com um aparato de Stern-Gerlach.

Aqui podemos nos perguntar quantos parâmetros independentes pode ter uma matriz de estado representado por uma matriz 2×2 ? Embora sejam 4 elementos de matriz, os elementos fora da diagonal podem ser complexos, somando ao todos 6 valores. Entretanto, os elementos da diagonal não são independentes, uma vez sua soma deve resultar na unidade. E os elementos fora da diagonal também não são independentes, pois a matriz deve ser Hermitiana. Com estas considerações, nota-se que existem apenas 3 elementos independentes, o que é consistente com a necessidade da medida de três quantidades independentes.

O problema de spin $1/2$ é bastante genérico e aplica-se a diversos sistemas de dois níveis. Um problema que pode ser tratado de forma similar é a determinação do estado de polarização de um feixe de laser. Neste caso, os estados de polarização independentes são a polarização linear vertical ou horizontal, polarização linear $+45$ ou -45 , polarização circularmente polarizada para a direita ou para a esquerda. Para tratar este problema utiliza-se as chamadas matrizes de Poincaré, que são análogas às matrizes de Pauli, mudando apenas seus nomes: $\sigma_z \rightarrow \sigma_1$, $\sigma_x \rightarrow \sigma_2$, $\sigma_y \rightarrow \sigma_3$. Os estados de polarização puras são dados por:

- $\rho = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \sigma_1)$: luz linearmente polarizada segundo x;
- $\rho = \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \sigma_1)$: luz linearmente polarizada segundo y;
- $\rho = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \sigma_2)$: luz linearmente polarizada segundo $+45$;
- $\rho = \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \sigma_2)$: luz linearmente polarizada segundo -45 ;
- $\rho = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \sigma_3)$: luz circularmente polarizada para a direita;
- $\rho = \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \sigma_3)$: luz circularmente polarizada para a esquerda.

Estado de spin $s = 1$

Agora ρ é uma matriz 3×3 . Precisamos conhecer 2 elementos diagonais (o terceiro sendo determinado por $\text{Tr}\rho = 1$.) e também as partes real e imaginária de seis elementos não diagonais (pois ρ é hermitiano). Isso significa que precisamos conhecer oito elementos, sendo três destes obtidos a partir de valores médios das componentes do operador de spin.

Os cinco elementos restantes podemos determinar com os operadores quadrupolares, que são quadráticos no spin: $(S_\alpha S_\beta + S_\beta S_\alpha)$ com $\alpha, \beta = x, y, z$. Somente cinco destes operadores são independentes, pois $S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = 2\hbar^2$. Usando uma representação matricial para ρ , os oito parâmetros necessários para descrevê-lo são $\{a_x, a_y, a_z, q_{xx}, q_{yy}, q_{xy}, q_{yx}, q_{zx}\}$. Essas quantidades são determinadas por:

$$a_\alpha = \frac{1}{\hbar^2} \text{Tr}(\rho S_\alpha), \quad \alpha = x, y, z \quad (8.19)$$

$$q_{\alpha\alpha} = \frac{1}{\hbar^2} \text{Tr}(\rho S_\alpha^2), \quad \alpha = x, y \quad (8.20)$$

$$q_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar^2} \text{Tr}[\rho(S_\alpha S_\beta + S_\beta S_\alpha)], \quad \alpha\beta = xy, yz, zx \quad (8.21)$$

gerando o operador ρ com a seguinte representação matricial:

$$\rho = \begin{pmatrix} 1 + \frac{1}{2}(a_z - q_{xx} - q_{yy}) & \left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{2}}\right)[a_x + q_{zx} - i(a_y + q_{yx})] & \frac{1}{2}(q_{xx} - q_{yy} - i q_{xy}) \\ \left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{2}}\right)[a_x + q_{zx} + i(a_y + q_{yz})] & -1 + q_{xx} + q_{yy} & \left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{2}}\right)[a_x - q_{zx} - i(a_y - q_{yz})] \\ \frac{1}{2}(q_{xx} - q_{yy} + i q_{xy}) & \left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{2}}\right)[a_x - q_{zx} + i(a_y - q_{yz})] & 1 - \frac{1}{2}(a_z + q_{xx} + q_{yy}) \end{pmatrix}.$$

A pergunta que resta é: como medir?

Podemos usar um aparato de Stern-Gerlach, com um campo inhomogêneo na direção x , tal que separe o feixe em três, um para cada componente do spin. Em cada feixe podemos medir o valor esperado do operador de spin daquela componente (x , y ou z). Em cada feixe também podemos medir o valor esperado do operador de spin ao quadrado, resultando em cinco medidas (lembre-se que uma medida dos operadores ao quadrado não é independente).

Para medir as três que faltam, q_{xy} , q_{yz} e q_{zx} precisamos fazer uma evolução dinâmica do nosso estado ρ desconhecido em um campo magnético uniforme B . Adicionamos um hamiltoniano de interação $H = -\vec{\mu} \cdot \mathbf{B}$. Colocando B na direção z o hamiltoniano fica $H = cS_z$ com a constante c incluindo a força do campo e o fator de proporcionalidade entre o momento magnético e o spin. Suponha que ligamos o campo num instante t após termos medido $\langle S_x^2 \rangle$. Fazendo isto diversas vezes podemos medir (ver §3.7):

$$\left. \frac{d}{dt} \langle S_x^2 \rangle \right|_{t=0} = \frac{i}{\hbar} \text{Tr}\{\rho [cS_z, S_x^2]\} = -c\hbar^2 q_{xy}, \quad (8.22)$$

ou seja, q_{xy} pode ser obtido da evolução temporal de S_x^2 . Similarmente, estes procedimentos podem ser repetidos para obtermos as outras duas componentes, determinando todos os elementos de ρ .

Estado de spin $s = 3/2$

O caso do spin $s = 3/2$ é trazido aqui apenas para exemplificar o aumento no número de elementos de matriz a serem determinados. No caso, serão 15. Para isto, para descrever ρ adequadamente será necessário medir três dipolos, cinco quadrupolos e sete octopolos. Seguindo a mesma lógica de número de elementos de matriz independentes, descreva porque não são necessários, ao todo, 15 medidas para se determinar ρ .

8.3 Estados de sistemas compostos

Consideremos um sistema composto, por exemplo, por duas partículas. É possível determinar este estado de múltiplas componentes? O estado do sistema como um todo fica determinado ao se determinar os estados dos componentes individualmente? Essas são perguntas importantes que iremos responder nessa seção.

Consideremos um estado de um sistema composto por duas partículas: $|a_m b_n\rangle = |a_m\rangle \otimes |b_n\rangle$ sendo que $\{|a_m\rangle\}$ denota a partícula 1 e $\{|b_n\rangle\}$ denota a partícula 2. Calculemos o valor esperado do observável R :

$$\langle R \rangle = \text{Tr}(\rho R) = \sum_{m,m'} \sum_{n,n'} \langle a_m b_n | \rho | a'_m b'_n \rangle \langle a'_m b'_n | R | a_m b_n \rangle, \quad (8.23)$$

consideremos $R = R^{(1)}$, um operador que opera apenas na partícula 1, ou seja:

$$\langle R^{(1)} \rangle = \sum_{m,m'} \sum_{n,n'} \langle a_m b_n | \rho | a'_m b'_n \rangle \langle a'_m | R^{(1)} | a_m \rangle \langle b'_n | b_n \rangle, \quad (8.24)$$

como $\langle b'_n | b_n \rangle = \delta_{n,n'}$ encontramos:

$$\langle R^{(1)} \rangle = \sum_{m,m'} \sum_n \langle a_m b_n | \rho | a'_m b_n \rangle \langle a'_m | R^{(1)} | a_m \rangle = \text{Tr}^{(1)}(\rho^{(1)} R^{(1)}), \quad (8.25)$$

onde para a última passagem definimos o chamado **operador de estado reduzido** (também chamado operador de estado parcial):

$$\rho^{(1)} = \text{Tr}^{(2)}(\rho) = \sum_n \langle a_m b_n | \rho | a'_m b_n \rangle, \quad (8.26)$$

baseado na operação $\text{Tr}^{(i)}$ que é denominada **traço parcial**, consistindo de uma operação de traço no espaço fator $i = 1$ ou 2 de ρ , que é a operação de fatoração da informação da partícula i . Analogamente define-se:

$$\rho^{(2)} = \text{Tr}^{(1)}(\rho), \quad (8.27)$$

o operador de estado parcial da partícula 2.

Pode-se demonstrar que $\text{Tr}^{(1)}(\rho^{(1)}) = 1$ e $[\rho^{(1)}]^\dagger = \rho^{(1)}$, enfim que operadores de estados parciais $\rho^{(1)}$ (8.26) e $\rho^{(2)}$ (8.27) apresentam as propriedades básicas de estados ((2.2),(2.3),(2.4)) e são suficientes para o cálculo de médias de qualquer variável dinâmica que pertença exclusivamente à componente 1 ou à componente 2. Entretanto, em geral estes dois operadores de estado parciais não são suficientes para determinar o estado composto de forma completa, porque não fornecem informação sobre *correlação* entre as componentes 1 e 2. Se for verdade que

$$\langle R^{(1)} R^{(2)} \rangle = \langle R^{(1)} \rangle \langle R^{(2)} \rangle. \quad (8.28)$$

para todo $\langle R^{(1)} \rangle$ e $\langle R^{(2)} \rangle$, então o estado é dito *descorrelacionado*, e terá a forma:

$$\rho = \rho^{(1)} \otimes \rho^{(2)}. \quad (8.29)$$

A equação (8.29) não é sempre válida. Se um sistema quântico for *correlacionado* não é possível descrever ρ a partir do produto tensorial de suas partes. Essa definição de correlação quântica pela negação de uma forma de descrever o sistema pode parecer inadequada, mas é a melhor forma de fazê-lo. O *emaranhamento* é um exemplo de correlação quântica que viola a equação (8.29). É digno de nota que mesmo a mais forte correlação clássica ainda é muito pequena se comparada com as correlações quânticas. Para mais detalhes a respeito, indicamos [5].

Classificação de estados:

De acordo com as possibilidades dos estados parciais de um sistema composto serem puros ou não, temos as distintas possibilidades sobre a pureza do estado composto como um todo. E, através da pureza dos estados componentes e do estado total, podemos ver se o sistema é correlacionado ou não. Todas essas possibilidades estão sintetizadas nas duas tabelas a seguir:

Estados parciais $\rho^{(1)}, \rho^{(2)}$	Estado total	
	puro	não-puro
puro, puro	sim ¹	não ^{6a}
puro, não-puro	não ^{6b}	sim ²
não-puro, não-puro	sim ³	sim ^{4,5}

Tabela 8.1: Pureza do estado total do sistema composto de acordo com as distintas possibilidades dos componentes do sistema. Os números sobrescritos junto aos sim e não indicam o número do item que demonstra sua validade (ver texto).

$\rho^{(1)}, \rho^{(2)}, \rho$	Correlacionado	Não-Correlacionado
puro, puro, puro	não ^{6c}	sim ¹
puro, não-puro, não-puro	não ^{6c}	sim ²
não-puro, não-puro, puro	sim ³	não ⁷
não-puro, não-puro, não-puro	sim ⁵	sim ⁴

Tabela 8.2: Correlação do sistema de acordo com as possibilidades para os estados componentes e o estado total do sistema. Os números sobrescritos entre parênteses junto aos sim e não indicam o número do item que demonstra sua validade (ver texto).

Pode parecer estranho duas linhas das tabelas anteriores terem “sim” em ambas colunas. De fato, no caso de termos, por exemplo, todos os componentes e o estado total não-puros, existe a possibilidade de o sistema ser correlacionado, assim como existe a possibilidade de o sistema não ser correlacionado. Apenas essa informação não é suficiente para decidir a esse respeito.

Antes de provar cada uma das entradas nas tabelas acima, é importante enunciar um teorema:

Teorema 10 (Teorema do fator de estado puro) *Se um dos estados parciais for puro, seu operador de estado deve ser um fator do operador do estado total. De outra forma: considere um operador de estado ρ válido ((2.2),(2.3),(2.4)) e sejam $\rho^{(1)} = \text{Tr}^{(2)}(\rho)$ e $\rho^{(2)} = \text{Tr}^{(1)}(\rho)$. Se o estado parcial $\rho^{(1)}$ descreve um estado puro, então $\rho = \rho^{(1)} \otimes \rho^{(2)}$.*

A prova deste teorema pode ser encontrada no livro do Ballentine [2]. Podemos agora justificar todos os sim e não encontrados nas duas tabelas anteriores, começando pelos sim:

1. Podemos ter $\rho^{(1)} = |\phi\rangle\langle\phi|$ (puro, (2.9)), $\rho^{(2)} = |\psi\rangle\langle\psi|$ (puro) e $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$, com $|\Psi\rangle = |\phi\rangle \otimes |\psi\rangle$ um estado puro multicomponente não correlacionado;
2. Podemos ter $\rho^{(1)}$ puro, de forma que $\text{Tr}^{(1)}\left[\left(\rho^{(1)}\right)^2\right] = 1$ e $\rho^{(2)}$ não puro, de forma que $\text{Tr}^{(1)}\left[\left(\rho^{(1)}\right)^2\right] < 1$. Pela identidade

$$\text{Tr}(\sigma \otimes \tau) = \text{Tr}^{(1)}(\sigma) \text{Tr}^{(2)}(\tau), \quad (8.30)$$

temos que para um estado não correlacionado $\rho = \rho^{(1)} \otimes \rho^{(2)}$, $\text{Tr}(\rho^2) = \text{Tr}^{(1)}\left[\left(\rho^{(1)}\right)^2\right]\text{Tr}^{(2)}\left[\left(\rho^{(2)}\right)^2\right] < 1$, ou seja, ρ é não puro.

3. Podemos ter $\rho^{(1)} = \frac{1}{2}(|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|) = \rho^{(2)}$, que representam duas partículas despolarizadas, ou seja, estados não puros (+ e - aqui podem indicar direção de spin, polarização, ou outro estado de dois níveis). Podemos ter um estado puro representado por $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$, onde $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle - |-, +\rangle)$. Este é um estado correlacionado pois se uma partícula é encontrada no estado +, a outra fica automaticamente determinada como estando no estado -;
4. Podemos ter $\rho^{(1)}$ não puro, de forma que $\text{Tr}^{(1)}\left[\left(\rho^{(1)}\right)^2\right] < 1$ e $\rho^{(2)}$ não puro, de forma que $\text{Tr}^{(1)}\left[\left(\rho^{(1)}\right)^2\right] < 1$. Para um estado não correlacionado $\rho = \rho^{(1)} \otimes \rho^{(2)}$, pela identidade (8.30) temos que $\text{Tr}(\rho^2) = \text{Tr}^{(1)}\left[\left(\rho^{(1)}\right)^2\right]\text{Tr}^{(2)}\left[\left(\rho^{(2)}\right)^2\right] < 1$, ou seja, ρ é não puro.
5. Podemos ter $\rho^{(1)} = \frac{1}{2}(|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|) = \rho^{(2)}$, que representam dois estados não puros. Podemos ter um estado não puro representado por $\rho = \frac{1}{2}(|+, +\rangle\langle+, +| + |-, -\rangle\langle-, -|)$. Este é um estado correlacionado. Existe 50% de chance de que as duas partículas estejam no estado +, e 50% de que ambas estejam no estado -, e a definição do estado de uma partícula implica na definição da outra.

Justificamos agora os não:

6. Considere que um dos estados do sistema composto não é puro. Pelo teorema do fator de estado puro, tome que $\rho = \rho^{(1)} \otimes \rho^{(2)}$. Sendo assim, $\text{Tr}\left[\left(\rho^{(1)} \otimes \rho^{(2)}\right)^2\right] = \text{Tr}^{(1)}\left[\left(\rho^{(1)}\right)^2\right]\text{Tr}^{(2)}\left[\left(\rho^{(2)}\right)^2\right]$, e podemos fazer três considerações: (a) se ambos os termos $\text{Tr}^{(1)}\left[\left(\rho^{(1)}\right)^2\right]$ e $\text{Tr}^{(2)}\left[\left(\rho^{(2)}\right)^2\right]$

forem 1, o produto será um; (b) se ambos os termos forem menor que um, o produto será um; sendo $\rho = \rho^{(1)} \otimes \rho^{(2)}$, este é um estado necessariamente não correlacionado;

7. Podemos ter dois estados não puros, valendo $\text{Tr}^{(1)}[(\rho^{(1)})^2] < 1$ e $\text{Tr}^{(2)}[(\rho^{(2)})^2] < 1$. Neste caso, só é possível obter $\text{Tr}[(\rho)^2] = 1$ se houverem elementos de correlação em ρ .

Correlação de estados emaranhados:

Estados emaranhados (um exemplo de estados correlacionados) são responsáveis por grande parte de diversos fenômenos peculiares em mecânica quântica. Uma forma de se produzir tais estados está ilustrada na figura 8.1.

Considere uma caixa que contém um material que emite partículas em direções aleatórias, porém sempre com momentos opostos ($\mathbf{k}_b = -\mathbf{k}_a$).

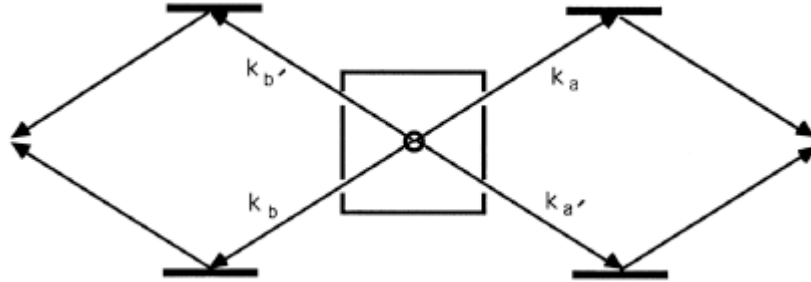


Figura 8.1: Aparato experimental para se gerar estados emaranhados. Extraído de [2].

A caixa restringe as partículas a duas direções possíveis, de tal forma que o estado das partículas que emergem da caixa é:

$$|\Psi_{12}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\mathbf{k}_a\rangle|\mathbf{k}_b\rangle + |\mathbf{k}_{a'}\rangle|\mathbf{k}_{b'}\rangle). \quad (8.31)$$

Nesse sistema os momentos de cada partícula emitida são emaranhados, ou seja, se a partícula 1 da direita tiver momento $\hbar\mathbf{k}_a$, então a partícula 2 da esquerda obrigatoriamente terá momento $\hbar\mathbf{k}_b$. Se a partícula 1 da direita tiver momento $\hbar\mathbf{k}_{a'}$, então a partícula 2 da esquerda obrigatoriamente terá momento $\hbar\mathbf{k}_{b'}$. Colocando um sistema de espelhos, como na figura, é possível direcionar os feixes de partículas de forma que um detector da partícula 1, colocado na região de superposição dos feixes, não distingue se a partícula

passou pelo caminho a ou a' . O mesmo vale para um detector da partícula 2, que não distinguirá b ou b' .

Considerando que de cada lado temos um sistema do tipo fenda dupla, pode-se imaginar que seriam medidos um padrão de interferência de um lado e outro padrão de interferência do outro lado, ou seja, o número de eventos esperados oscilaria com a posição de um detector em x_1 , e o mesmo valeria para um detector em x_2 . Entretanto, o resultado previsto pela mecânica quântica e observado experimentalmente não é este. Padrões de interferência na intensidade do feixe em 1 ou 2 só seriam observáveis se o sistema fosse descorrelacionado. A existência de emaranhamento faz com que só seja possível obter o padrão de interferência se fizermos medidas simultâneas em ambos feixes, ou seja, posicionando o detector 1 em um ponto x_1 fixo, e mudando a posição x_2 do detector 2, e considerando apenas medidas em coincidência (partículas chegando em x_1 e x_2 simultaneamente).

Este problema pode ser formalizado matematicamente considerando funções do tipo onda plana e dois detectores em x_1 e x_2 . Teríamos:

$$\Psi_{12}(x_1, x_2) \propto \exp^{i(k_a x_1 + k_b x_2)} \exp^{i(k_{a'} x_1 + k_{b'} x_2)}, \quad (8.32)$$

de forma que

$$|\Psi_{12}(x_1, x_2)|^2 \propto 1 + \cos[(k_a - k_{a'})x_1 + (k_b - k_{b'})x_2]. \quad (8.33)$$

Uma medida de número de eventos de medição da partícula 1 em função da posição x_1 do detector, independente da medida partícula 2, é obtida pelo cálculo de $|\Psi_{12}(x_1, x_2)|^2$ integrado em dx_2 , que dá um valor constante. Entretanto, uma medida correlacionada do número de eventos de medição da partícula 1 em função da posição x_1 do detector, condicionado à medição da partícula 2, por exemplo em $x_2 = 0$, oscilaria com o termo $\cos[(k_a - k_{a'})x_1]$, gerando um típico padrão de interferência.

O padrão de interferência tipo fenda dupla seria observado se o sistema não fosse emaranhado, de forma que $|\Psi_{12}\rangle = |\Psi_1\rangle \otimes |\Psi_2\rangle$, que seria representado por uma função de onda diferente da Eq.(8.32).

8.4 Relações de indeterminação

Numa forma elementar, um estado pode ser identificado como uma especificação sobre a distribuição de probabilidades de cada observável. Entretanto essas distribuições de probabilidade das variáveis dinâmicas podem estar inter-relacionadas. Em outras palavras, as definições das distribuições de probabilidades de duas variáveis dinâmicas não são, necessariamente, independentes.

Sejam três variáveis dinâmicas A e B tais que:

$$[A, B] = iC, \quad C^\dagger = C, \quad (8.34)$$

para um estado arbitrário ρ . Definindo dois operadores $A_0 = A - \langle A \rangle$ e $B_0 = B - \langle B \rangle$ temos que as variâncias de A e de B (1.84) serão dadas por (2.1):

$$\Delta_A^2 = \text{Tr}(\rho A_0^2), \quad \Delta_B^2 = \text{Tr}(\rho B_0^2). \quad (8.35)$$

Fazendo uso da desigualdade:

$$\text{Tr}(\rho T T^\dagger) \geq 0, \quad (8.36)$$

e definindo $T = A_0 + i\omega B_0$ encontramos:

$$\text{Tr}(\rho T T^\dagger) = \text{Tr}(\rho A_0^2) - i\omega \text{Tr}(\rho [A_0, B_0]) + \omega^2 \text{Tr}(\rho B_0^2) \geq 0. \quad (8.37)$$

Esta é uma equação de segundo grau para ω que se anula quando:

$$\omega = -\frac{\text{Tr}(\rho C)}{2\text{Tr}(\rho B_0^2)}, \quad (8.38)$$

o que nos permite reescrever:

$$\text{Tr}(\rho T T^\dagger) = \text{Tr}(\rho A_0^2) \text{Tr}(\rho B_0^2) - \frac{\{\text{Tr}(\rho C)\}^2}{4} \geq 0, \quad (8.39)$$

e então, finalmente:

$$\Delta_A^2 \Delta_B^2 \geq \frac{\{\text{Tr}(\rho C)\}^2}{4}, \quad (8.40)$$

a chamada **relação de incerteza generalizada**. De forma mais compacta ela pode ser escrita como sendo:

$$\Delta_A^2 \Delta_B^2 \geq \frac{1}{2} |\langle C \rangle|, \quad (8.41)$$

válida para todo A, B que tem $[A, B] = iC$.

Exemplo 17 Para os operadores posição e momento, em que $[Q, P] = i\hbar$, temos:

$$\Delta_A \Delta_B \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (8.42)$$

a conhecida relação de incerteza de Heisenberg.

Esta relação impõe condições no estado de incerteza mínima (igualdade em (8.42)). Consideremos um estado puro $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ e seja $T = Q + i\omega P$. Na representação das coordenadas:

$$T = x + \frac{\hbar^2}{2\Delta_P^2} \frac{\partial}{\partial x}, \quad (8.43)$$

pois estamos assumindo que $\omega = -\frac{\hbar}{2\Delta_P^2}$ para que seja válida a igualdade na equação (8.42). A partir de $\text{Tr}(\rho T T^\dagger) = 0$, temos que $T^\dagger|\psi\rangle = 0$, e daí:

$$T^\dagger|\psi\rangle = \left(x + \frac{\hbar^2}{2\Delta_P^2} \frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x) = 0, \quad (8.44)$$

chamando $\alpha = \hbar^2/2\Delta_P^2$ e fazendo transformações unitárias de volta para que $\langle Q \rangle = x_0$ e $\langle P \rangle = \hbar k_0$ temos que a solução da equação anterior é da forma:

$$\psi(x) = ce^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\Delta_Q^2} + ik_0x}, \quad (8.45)$$

que tem a forma de uma Gaussiana.

O mínimo de incerteza só é possível para estados puros. Isto pode ser visto considerando um estado misto $\rho = \langle\phi_n|TT^\dagger|\phi_n\rangle$. Temos que $\text{Tr}(\rho T T^\dagger) = 0$ admite a solução da forma (8.45) para todo valor de n . Porém, é possível mostrar que duas soluções da forma da equação (8.45) não são ortogonais, portanto não é possível construir uma base de autofunções ortogonais a partir dessa construção. Isso, então, significa que o estado misto possui apenas um componente, $\rho = |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$, ou seja, é um estado puro.

Exemplo 18 Para as componentes do momento angular temos que $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$ então:

$$\Delta_{J_x}^2 \Delta_{J_y}^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \langle J_z \rangle^2, \quad (8.46)$$

a relação de incerteza é mínima (a desigualdade se torna uma igualdade) para o estado puro $\rho = |j, m\rangle\langle j, m|$ quando $|m| = j$.

8.5 Exercícios

Exercício 8.1 A partir das equações (8.15), demonstre as equações (8.16). Dica: considere $\rho = \sum_{ij} r_{ij} |r_i\rangle\langle r_j|$.

Exercício 8.2 Utilizando as matrizes de Pauli, demonstre a equação (8.18).

Exercício 8.3 *Escreva as formas matriciais dos 6 operadores de estados de polarização puros discriminados na §8.2. Faça um desenho da esfera de Poincaré e localize nela estes 6 estados.*

Exercício 8.4 *Demonstre que a Eq. (8.28) vale para estados não correlacionados.*

Exercício 8.5 *Demonstre que a Eq.(8.33) não gera padrão de interferência para medidas descorrelacionadas. Proponha a forma da função de onda $\Psi_{12}(x_1, x_2)$ para estados descorrelacionados e demonstre que, neste caso, uma medida descorrelacionada leva ao padrão de interferência.*

Exercício 8.6 *Escreva os estados parciais e totais das justificativas 3 e 5 em §8.3 na forma matricial e justifique a identificação dos estados totais como puros ou não puros com base no $\text{Tr}(\rho^2)$.*

Exercício 8.7 *A relação de incerteza em posição e momento é dada por:*

$$\Delta_A \Delta_B \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (8.47)$$

sabemos que a constante reduzida de Planck é da escala de 10^{-34} J.s. Suponha, hipoteticamente, que ela é da ordem de grandeza de 10 J.s (equivalente a energia potencial gravitacional de uma massa de 1 kg elevado a uma altura de 1 m na Terra). Quais as consequências para a mecânica quântica isso teria? Discuta as possíveis mudanças.

Exercício 8.8 *Baseando-se no exercício anterior em que supomos que a constante de Planck é muito grande agora vamos pensar o contrário. Suponha que a constante de Planck é zero. Quais as consequências para a mecânica quântica isso teria? Discuta as possíveis mudanças.*

Exercício 8.9 *Resolva os exercícios do livro do Ballentine [2].*