Fundamentos de teoria quântica

Aula 4: Teoria quântica

Rafael Rabelo – rabelo@ifi.unicamp.br

Departamento de Física da Matéria Condensada
Instituto de Física "Gleb Wataghin"
Universidade Estadual de Campinas

Sistemas quânticos

Um sistema quântico é qualquer coisa que admite uma descrição dinâmica fechada dentro da teoria quântica.

Asher Peres

Espaços de Hilbert

A todo sistema quântico é associado um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$:

- espaço vetorial;
- dotado de produto interno;
- no qual toda sequência de Cauchy é convergente.

Neste curso, serão considerados apenas espaços de Hilbert complexos de dimensão finita d,

$$\mathcal{H} = \mathbb{C}^d. \tag{1}$$

Notação de Dirac

Um vetor arbitrário de $\mathcal{H}$ será denotado $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = [\psi_1, \ldots, \psi_d]^T = \sum_{i=1}^{d} \psi_i |i\rangle . \quad \text{[ket psi]} \tag{2}$$

Para todo vetor de $\mathcal{H}$, existe um elemento dual, denotado $\langle\psi|$:

$$\langle\psi| = [\psi_1^*, \ldots, \psi_d^*] = \sum_{i=1}^{d} \psi_i^* \langle i| . \quad \text{[bra psi]} \tag{3}$$

Produto interno

O produto interno entre dois vetores é dado pelo *bracket*:

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_{i=1}^{d} \psi_i^* \phi_i = \langle\phi|\psi\rangle^* . \tag{4}$$

O produto interno induz uma norma em $\mathcal{H}$:

$$||\,|\psi\rangle\,||^2 = \langle\psi|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{d} |\psi_i|^2. \tag{5}$$

Base ortonormal

Um conjunto de d vetores $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^{d}$ é uma *base ortonormal* de $\mathcal{H}$ se, para todo par $i, j \in \{1, \ldots, d\}$:

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}. \tag{6}$$

Estados puros

O *estado puro* de um sistema quântico é representado por um vetor normalizado do espaço de Hilbert $\mathcal{H}$:

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H} : || \, |\psi\rangle \, || = 1. \tag{7}$$

Dois vetores que são iguais a menos de uma fase global representam o mesmo estado quântico:

$$|\psi\rangle \sim e^{i\varphi} \, |\psi\rangle \, . \tag{8}$$

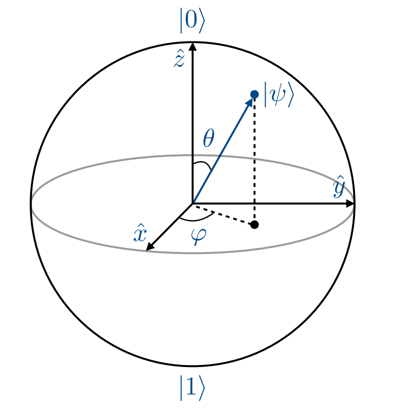
Qubit: $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$

O estado puro $|\psi\rangle$ de um qubit pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle && (9)\\
&= |\alpha|\,e^{i\varphi_\alpha}\,|0\rangle + |\beta|\,e^{i\varphi_\beta}\,|1\rangle && (10)\\
&= \cos(\delta)\,e^{i\varphi_\alpha}\,|0\rangle + \sin(\delta)\,e^{i\varphi_\beta}\,|1\rangle \quad \text{[normalização]} && (11)\\
&= \cos(\delta)\,|0\rangle + \sin(\delta)\,e^{i(\varphi_\beta-\varphi_\alpha)}\,|1\rangle \quad \text{[fase global]} && (12)\\
&= \cos(\theta/2)\,|0\rangle + \sin(\theta/2)\,e^{i\varphi}\,|1\rangle\,.
\end{aligned}$$

Esfera de Bloch

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2)\,|0\rangle + \sin(\theta/2)\,e^{i\varphi}\,|1\rangle\,. \tag{13}$$



Operadores

Um operador A é um objeto que atua sobre o espaço de Hilbert do sistema, $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, transformando seu estado.

Operadores lineares

Um operador A é linear se

$$A(\alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle) = \alpha A|\psi\rangle + \beta A|\psi\rangle\,. \tag{14}$$

O conjunto de operadores lineares atuando sobre o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, denotado $\mathcal{L}_{\mathcal{H}}$, forma um espaço vetorial complexo de dimensão d^2.

Matrizes

Operadores lineares podem ser vistos como matrizes $d \times d$, que, na base $\{|i\rangle\}$, são escritas como

$$A = \sum_{ij} A_{ij} |i\rangle\langle j| . \tag{15}$$

Produto externo

O objeto $|i\rangle\langle j|$ é um operador, dado pelo *produto externo* entre os vetores $|i\rangle$ e $|j\rangle$.

Operações importantes sobre operadores

- Traço:

$$\mathrm{Tr}\,(A) = \sum_i \langle i|\,A\,|i\rangle\,. \tag{16}$$

- Conjugação:

$$A^* = \sum_{ij} A^*_{ij}\,|i\rangle\!\langle j|\,. \tag{17}$$

- Transposição:

$$A^T = \sum_{ij} A_{ij}\,|j\rangle\!\langle i|\,. \tag{18}$$

- Conjugação hermitiana:

$$A^\dagger = \sum_{ij} A^*_{ij}\,|j\rangle\!\langle i|\,. \tag{19}$$

Operadores normais

Um operador A é dito *normal* se

$$\left[A, A^\dagger\right] = AA^\dagger - A^\dagger A = 0. \tag{20}$$

Decomposição espectral

Todo operador normal admite uma *decomposição espectral*:

$$A = \sum_i a_i \, |a_i\rangle\langle a_i| \, . \tag{21}$$

O números complexos a_i são ditos *autovalores* e os vetores $|a_i\rangle$ são ditos *autovetores* de A.

Operadores unitários

Um operador U é dito *unitário* se

$$U^\dagger = U^* = U^{-1}. \tag{22}$$

Propriedades importantes:

- Preservam norma: $\|U\,|\psi\rangle\| = \||\psi\rangle\|$.
- Preservam produto interno: $\left(\langle\phi|\,U^\dagger\right)(U\,|\psi\rangle) = \langle\phi|\psi\rangle$.
- Normais: $U = \sum_j u_j\,|u_j\rangle\langle u_j|$.
- Autovalores unitários: $u_j = e^{i\varphi_j}$.
- Autovetores ortonormais: $\langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij}$.

Grupo unitário

O conjunto das matrizes unitárias $n \times n$, juntamente com a operação de multiplicação de matrizes, formam o *grupo unitário de ordem n*, denotado $U(n)$.

Um subgrupo importante é o *grupo unitário especial*, de matrizes unitárias $n \times n$ com determinante igual a 1. Este grupo é denotado $SU(n)$.

Operadores hermitianos

Um operador A é dito *hermitiano* se

$$A = A^\dagger. \tag{23}$$

Propriedades importantes:

- Normais: $A = \sum_j a_j \, |a_j\rangle\langle a_j|$.
- Autovalores reais: $a_j \in \mathbb{R}$.
- Autovetores ortonormais: $\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}$.

O conjunto dos operadores hermitianos atuando sobre o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ será denotado $\mathcal{D}_{\mathcal{H}}$, e forma um espaço vetorial real de dimensão d^2.

Operadores positivos

Um operador A é dito *positivo semi-definido* se, para todo $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$,

$$\langle\psi| A |\psi\rangle \geq 0. \tag{24}$$

Propriedades importantes:

- Normais: $A = \sum_j a_j |a_j\rangle\langle a_j|$.
- Autovalores não-negativos: $a_j \geq 0$.
- Autovetores ortonormais: $\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}$.

O conjunto dos operadores positivos semi-definidos atuando sobre o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ será denotado $\mathcal{D}^+_{\mathcal{H}}$, e forma um cone convexo real de dimensão d^2.

Operadores projetivos

Um operador Π é um *projetor* se

$$\Pi^2 = \Pi. \tag{25}$$

Propriedades importantes:

- Normais: $\Pi = \sum_j p_j \, |p_j\rangle\langle p_j|$.
- Autovalores binários: $p_j \in \{0, 1\}$.
- Autovetores ortonormais: $\langle p_i | p_j \rangle = \delta_{ij}$.

Exemplos importantes em $\mathbb{C}^2$

- Operador identidade:

$$\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{26}$$

- Matrizes de Pauli:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{27}$$

Operador densidade

O estado mais geral de um sistema quântico é um *estado misto*, representado pelo *operador densidade*, um operador ρ que atua sobre $\mathcal{H}$ e tal que:

- Positivo semi-definido: $\rho \geq 0$;
- Normalizado: $\mathrm{Tr}\,(\rho) = 1$.

Misturas

Todo operador densidade ρ pode ser escrito como uma mistura – ou combinação convexa – de projetores unidimensionais:

$$\rho = \sum_i p_i \, |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \,, \tag{28}$$

onde $p_i \geq 0$, e $\sum_i p_i = 1$, ou seja, são probabilidades.

Operador densidade do estado puro

Em geral, a mistura não é única. As exceções são os *estados puros*:

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \,. \tag{29}$$

Operador densidade de um qubit

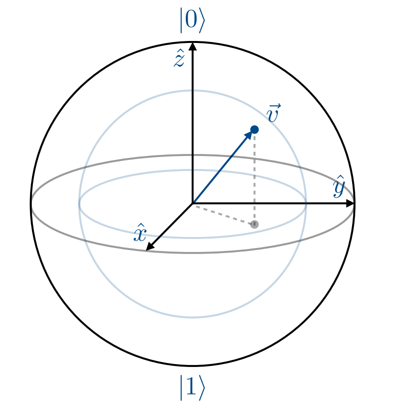
O estado ρ de um qubit pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + v_z & v_x - i v_y \\ v_x + i v_y & 1 - v_z \end{pmatrix} && (30) \\ &= \frac{1}{2} \left(\mathbb{1} + v_x \sigma_x + v_y \sigma_y + v_z \sigma_z \right) && (31) \\ &= \frac{1}{2} \left(\mathbb{1} + \vec{v} . \vec{\sigma} \right). \end{aligned}$$

A condição de positividade exige que $\|\vec{v}\| \leq 1$, com igualdade se, e somente se, ρ é puro.

Bola de Bloch

$$\rho = \frac{1}{2}\left(\mathbb{1} + \vec{v}.\vec{\sigma}\right) \qquad (32)$$



Operações

Uma *operação* sobre um sistema é representada por uma mapa linear M que leva cada estado ρ a um novo estado $M[\rho]$.

A fim de preservar as propriedades do operador densidade, M deve ser um *mapa completamente positivo* e preservar o traço.

Mapas com estas propriedades são muitas vezes chamados de *superoperadores*.

Mapas positivos

Um *mapa positivo* é um mapa linear que mapeia operadores positivos em operadores positivos, ou seja, se $\rho \geq 0$, então $M\left[\rho\right] \geq 0$.

Equação de movimento

A evolução dinâmica de um sistema quântico fechado é governada pelo seu Hamiltoniano H por meio da *equação de von Neumann*:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] = -\frac{i}{\hbar}(H\rho - \rho H)\,. \tag{33}$$

Evolução de estados puros

Para estados puros, a equação de von Neumann se reduz à *equação de Schrödinger*:

$$\frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} H |\psi\rangle \,. \tag{34}$$

Operador de evolução

A evolução do sistema de um estado inicial $\rho(0)$ a um estado final $\rho(t)$, regida pela equação de von Neumann, é dada por um operador unitário $U(t)$, e pode ser vista como a aplicação de um mapa $M(t)$:

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U^{\dagger}(t) = M(t)\left[\rho\right]. \tag{35}$$

Medições projetivas (MPs)

Em uma *medição projetiva* x, a cada possível resultado a é associado um projetor $\Pi_{a|x}$, de forma que:

- $\Pi_{a|x}\Pi_{a'|x} = \delta_{a,a'}\Pi_{a|x}$,
- $\sum_a \Pi_{a|x} = \mathbb{1}$.

Regra de Born

Se a medição x é realizada sobre um sistema no estado ρ, então a probabilidade de se obter o resultado a é dada pela *regra de Born*:

$$p(a|x) = \mathrm{Tr}\left(\rho\Pi_{a|x}\right). \tag{36}$$

Estado após uma MP

O estado do sistema imediatamente após a medição projetiva x, quando foi obtido o resultado a, é dado por

$$\rho_{a|x} = \frac{\left(\Pi_{a|x}\right) \rho \left(\Pi_{a|x}\right)}{\mathrm{Tr}\left(\rho \Pi_{a|x}\right)}. \tag{37}$$

Repetibilidade

As medições projetivas são *repetíveis*: se a mesma medição projetiva é realizada duas vezes, em sequência, o resultado da segunda medição será idêntico ao da primeira.

Número de resultados

O número máximo de resultados de uma medição projetiva é igual à dimensão do sistema, d.

Remixagem

Suponha que a uma medição projetiva x é realizada sobre um sistema no estado ρ. Algum resultado é obtido, mas, por alguma razão, não sabe-se qual. Seja ρ_x o estado do sistema após a medição. Sua melhor descrição é dada por uma média sobre os estados pós-medição para cada um dos possíveis resultados, ponderada por suas respectivas probabilidades:

$$\begin{aligned}\rho_x = & \sum_a p(a|x) \frac{\left(\Pi_{a|x}\right) \rho \left(\Pi_{a|x}\right)}{p(a|x)} = \sum_a \left(\Pi_{a|x}\right) \rho \left(\Pi_{a|x}\right) \\ \neq & \rho \text{ (em geral).}\end{aligned} \tag{38}$$

Observáveis

Um *observável* é um operador hermitiano que atua sobre $\mathcal{H}$, representando uma *propriedade física* do sistema.

Observáveis e MPs

Todo observável A_x está associado a uma medição projetiva através de sua decomposição espectral:

$$A_x = \sum_a A_a \left|\psi_a\middle\rangle\!\middle\langle\psi_a\right| = \sum_a A_a \Pi_{a|x}. \tag{39}$$

Os possíveis valores de A_x são seus autovalores, os elementos do conjunto $\{A_a\}$.

Valor esperado de um observável

O valor esperado do observável A_x, quando medido no estado ρ, é:

$$\begin{aligned}
\langle A_x \rangle &= \sum_a A_a p(a|x) && (40) \\
&= \sum_a A_a \mathrm{Tr}\left(\rho \Pi_{a|x}\right) && (41) \\
&= \mathrm{Tr}\left(\rho A_x\right).
\end{aligned}$$

POVMs – Positive Operator-Valued Measures

Em um POVM x, a cada possível resultado a é associado a um operador positivo semi-definido $E_{a|x}$, de forma que:

- $E_{a|x} \geq 0$,
- $\sum_a E_{a|x} = \mathbb{1}$.

Regra de Born

Se o POVM x é realizado sobre um sistema no estado ρ, então a probabilidade de se obter o resultado a é dada pela *regra de Born*:

$$p(a|x) = \mathrm{Tr}\left(\rho E_{a|x}\right). \tag{42}$$

Estado após uma MP

O estado do sistema imediatamente após um POVM x, quando foi obtido o resultado a, é dado por

$$\rho_{a|x} = \frac{\left(E_{a|x}^{1/2}\right)\rho\left(E_{a|x}^{1/2}\right)}{\mathrm{Tr}\left(\rho E_{a|x}\right)}. \tag{43}$$

Instrumentos

Os operadores $I_{a|x} = E_{a|x}^{1/2}$ são ditos *instrumentos de medição*.

Diferentes instrumentos podem dar origem ao mesmo POVM.

Não-repetibilidade

Ao contrário das medições projetivas, POVMs não são, em geral, repetíveis.

Número de resultados

POVM's podem ter um número arbitrário de resultados, não sendo limitados pela dimensão do sistema, d.