

Aulas T2 - SFI5905

Sérgio R. Muniz - IFSC/USP

9 de abril de 2021

Operador Densidade

No estudo de processos incoerentes, ou dissipativos, é necessário usar uma descrição estatística dos estados quânticos. Para isso, é conveniente expandir o formalismo de vetores de estado, visto até agora, para ir além da descrição de estados puros e incluir estados físicos construídos através da mistura estatística dos estados puros. Isso é feito usando o conceito de **operador de densidade**, no lugar dos vetores de estado (ou funções de ondas), na representação do estado quântico. Esse formalismo permite facilmente construir distribuições estatísticas de estados quânticos, e usar a mesma formulação matemática tanto para estados puros como misturas estatísticas.

Ensembles e mistura estatística de estados puros

Os cursos introdutórios e livros textos tradicionais de mecânica quântica não costumam enfatizar o suficiente o processo de medida. Quando o fazem, a ênfase se limita a destacar características que são marcadamente diferentes do caso clássico, geralmente envolvendo estados de superposição, mas frequentemente limitam-se a estados puros e (artificialmente) bem definidos. Isto é, mesmo no caso de estados de superposição, os coeficientes são conhecidos sem incertezas associadas. Situações reais, no laboratório, raramente são assim, mesmo quando ignorados os (inevitáveis) processos de decoerência dos estados quânticos envolvidos.

Para entender a motivação e necessidade do operador densidade é importante lembrar que há dois tipos de indeterminismo na mecânica quântica. Um deles é intrínseco ao processo de medida, mesmo quando o estado do sistema é totalmente definido (*i.e.*, todos os coeficientes são conhecidos), enquanto o outro tipo vem da indeterminação do próprio estado quântico, que, em geral, não é perfeitamente conhecido. Para perceber melhor a distinção e as implicações disso, vale considerar alguns exemplos.

Exemplo 1

Considere um sistema de dois níveis, com uma base ortonormal de estados estacionários $|n\rangle = \{|1\rangle, |2\rangle\}$, e um conjunto $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle\}$ de três possíveis estados do espaço de Hilbert no qual esse sistema pode ser preparado:

$$\begin{aligned}|\psi_1\rangle &= |1\rangle \\|\psi_2\rangle &= |2\rangle \\|\psi_3\rangle &= \frac{|1\rangle + |2\rangle}{\sqrt{2}}.\end{aligned}$$

Suponha que o sistema seja preparado em um desses estados e um observador deseja determinar o estado, sem saber *a priori* qual estado foi preparado. É evidente concluir que o observador terá que fazer muitas medidas, mesmo que tivesse a seu dispor um medidor extremamente preciso, pois uma única (ou poucas) medida não permite(m) determinar completamente o estado. Mesmo após várias medidas repetidas com a mesma resposta, não se pode garantir que a seguinte será igual as anteriores.

Por exemplo, se as primeiras medidas resultassem no estado $|1\rangle$ não se poderia excluir totalmente o estado $|\psi_3\rangle$. Para chegar a alguma conclusão, é necessário realizar um grande número de medidas e construir uma estatística dos resultados, para associar uma certa probabilidade p_k de que o sistema tenha sido preparado no estado $|\psi_k\rangle$, bem como determinar a incerteza associada à medida. Quanto maior o número de medidas, maior a confiança e, por consequência, menor será a incerteza sobre o resultado correto.

Naturalmente, para que N medidas possam ser feitas de forma independente, é necessário "reiniciar" o estado (*i.e.*, repetir a preparação *idêntica* do estado) antes de fazer novas medidas, para que as condições sejam as mesmas. Alternativamente, pode-se imaginar uma coleção de N sistemas idênticos (*ensemble*) preparados todos da mesma forma e fazer as medidas em cada um desses sistema. Se após as medidas observa-se aproximadamente $N/2$ medidas em cada um dos dois estados $\{|n\rangle\}$ da base, pode-se ter alguma confiança de que o estado preparado é $|\psi_3\rangle$.

No caso deste exemplo, a indeterminação é intrínseca à natureza do sistema quântico, e não está relacionada a incertezas das medidas em si. Mesmo que o sistema fosse perfeitamente preparado no estado $|\psi_3\rangle$, e medido em um aparato extremamente preciso, a incerteza (Δn) final sobre os estados $|n\rangle$ seria da ordem $\Delta n \propto 1/\sqrt{N}$, inversamente proporcional à raiz quadrada do número de medidas.

Note que a incerteza Δn é de natureza clássica, associada às informações obtidas através das medidas, refletindo a indeterminação com relação aos estados $|n\rangle$. Essa segunda indeterminação, portanto, é do segundo tipo, e não tem nada a ver com a natureza quântica do sistema.

Assim, se após um número muito grande de medidas tivermos confiança que o sistema foi preparado, por exemplo, no estado $|\psi_1\rangle$, podemos calcular o valor médio de um certo observável, como a energia, e determinar que $\langle E \rangle = \langle E_1 \rangle = \langle \psi_1 | H | \psi_1 \rangle$. Mas, se soubéssemos que é o estado ψ_3 , teríamos $\langle E \rangle = p_1 \langle E_1 \rangle + p_2 \langle E_2 \rangle$, e $p_1 = p_2 = \frac{1}{2}$.

Exemplo 2

Considere agora um *ensemble* do mesmo sistema, preparado de forma que metade dos sistemas estão no estado $|\psi_1\rangle$ e a outra metade no estado $|\psi_2\rangle$. Neste caso, embora os resultados de algumas medidas possam ser idênticos àqueles do estado $|\psi_3\rangle$, a situação

física é bastante distinta. É importante destacar que a distinção se dá não apenas pela presença do *ensemble* (i.e., múltiplos sistemas) versus o caso de um único sistema. Pois, poderíamos preparar um único sistema metade das vezes no estado $|\psi_1\rangle$ e a outra metade no estado $|\psi_2\rangle$. Da mesma forma, poderíamos escolher quaisquer conjuntos de porcentagens p_k para os estados $|\psi_k\rangle$, para imitar os coeficientes de um estado de superposição equivalente.

Na verdade, há inúmeras situações que poderiam ser construídas, como, por exemplo, ter 25% em $|\psi_1\rangle$, 25% em $|\psi_2\rangle$ e 50% em $|\psi_3\rangle$; ou 10% no $|\psi_1\rangle$, 10% em $|\psi_2\rangle$ e 80% em $|\psi_3\rangle$, etc... Todas essas composições resultariam, por exemplo, no mesmo valor esperado (valor médio) da energia $\langle E \rangle = 1/2(\langle E_1 \rangle + \langle E_2 \rangle)$, ou na mesma probabilidade de encontrar o estado $|1\rangle$. A diferença está na natureza física dos estados de superposição coerente e de mistura estatística clássica, que são fisicamente bem distintas.

A questão agora é: *como generalizar a forma de calcular o valor esperado de qualquer estado, seja um estado puro ou uma mistura estatística?* Outra questão relacionada, e bastante relevante, é como expressar, em geral, esses estados de mistura estatística (i.e., não apenas calcular os valores esperados) para calcular qualquer grandeza física relevante? Como, por exemplo, determinar a evolução temporal (dinâmica quântica). Seria desejável também, se possível, tentar encontrar um formalismo unificado capaz de representar essas diferentes situações físicas, bem diversas. É justamente isso que a ferramenta **operador densidade** se propõe a fazer.

Definição

Dado um conjunto de estados puros $\{|\psi_k\rangle\}$ e probabilidades p_k (tal que $p_k \in \mathbb{R} : [0, 1]$) associadas a esses estados, o operador densidade ($\hat{\rho}$) é definido por:

$$\hat{\rho} \equiv \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|$$

onde $\sum_k p_k = 1$ e $\langle \psi_k | \psi_k \rangle = 1$.

Estado de mistura (*mixed states*)

Podemos pensar no estado de mistura estatística como uma coleção de estados puros, seguindo uma certa distribuição de probabilidades. Aqui, vale lembrar o caso descrito no Exemplo 2, que agora pode ser expresso facilmente nessa definição do operador.

É fácil verificar que essa definição não só reproduz e generaliza o resultado dos valores esperados (valores médios) de um operador (qualquer), como a energia, por exemplo, mas também unifica a notação, permitindo representar também estados puros, usando os mesmos procedimentos de cálculo, como será discutidos adiante.

Os estados de mistura podem ser misturas parciais ou completas (quando todos os estados têm a mesma probabilidade). Assim, se a dimensão do espaço for n , a probabilidade de cada estado será $p_k = \frac{1}{n}$, $\forall k \in \{|\psi_k\rangle\}$.

Estado puro

Se o estado do sistema é totalmente conhecido (pelo menos em princípio), com probabilidade $p_\psi = 1$, temos um estado puro. O operador densidade de um estado puro também pode ser facilmente escrito a partir da definição, como o produto diádico (produto externo, ou projetor) do vetor estado:

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|,$$

No caso de dimensão 2, na representação matricial 2×2

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix}$$

De forma mais explícita, no caso do estado $|\psi\rangle = c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle$, isso corresponde à

$$\rho = \begin{pmatrix} c_1 c_1^* & c_1 c_2^* \\ c_2 c_1^* & c_2 c_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |c_1|^2 & c_1 c_2^* \\ c_2 c_1^* & |c_2|^2 \end{pmatrix}.$$

No caso mais geral, $|\psi\rangle = \sum_i^n c_i |i\rangle$,

$$\rho = \begin{pmatrix} |c_1|^2 & c_1 c_2^* & \dots & c_1 c_n^* \\ c_2 c_1^* & |c_2|^2 & \dots & c_2 c_n^* \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_n c_1^* & \dots & \dots & |c_n|^2 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\rho} = \underbrace{\sum_{i=1}^n |c_i|^2 |i\rangle\langle i|}_{\text{populações}} + \underbrace{\sum_{i \neq j}^n c_i c_j^* |i\rangle\langle j|}_{\text{coerências}}$$

onde o primeiro termo representa as populações e o segundo termo as coerências.

O significado dos elementos da diagonal principal é bastante claro. Para entender o significado dos elementos fora da diagonal principal pode ser útil lembrar a representação polar dos coeficientes complexos, onde $c_i = |c_i|e^{-i\theta_i}$. Dessa forma, temos que o produto $c_i c_j^* = |c_i||c_j|e^{-i(\theta_i - \theta_j)}$ corresponde a relação de fase (coerência) entre os termos. Uma relação de fase definida é o que permite a observação do fenômeno de interferência quântica. Se todos os termos fora da diagonal principal são nulos, não há relação de fase entre as componentes do estado e, portanto, não há coerência quântica, o que corresponde à situação de máxima mistura (estatística) dos estados.

É importante lembrar, porém, que a representação matricial depende da base utilizada. Portanto, para determinar a pureza do estado a melhor medida é observar o valor de $\text{Tr}(\hat{\rho}^2)$, que representa um invariante do operador, e não depende da base.

Propriedades

1. O operador densidade é Hermitiano $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$
2. Os autovalores do operador densidade satisfazem $0 \leq \lambda_i \leq 1$
3. O traço de qualquer operador densidade é sempre unitário, $\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1$
4. O traço do quadrado do operador mede a pureza do estado, sendo

$$\frac{1}{n} \leq \text{Tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1$$

5. Para estados puros, $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$
6. Para estados de mistura estatística, $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) < 1$
7. Num espaço de dimensão n , o estado de máxima mistura tem

$$\hat{\rho} = \frac{1}{n} \mathbf{1}, \text{ e } \text{Tr}(\hat{\rho}^2) = \frac{1}{n}$$

8. O valor esperado (valor médio) de um operador \hat{A} é dado por

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}) = \text{Tr}(\hat{A} \hat{\rho})$$

9. O operador densidade é positivo, $\langle \hat{\rho} \rangle \geq 0$
10. A evolução temporal é descrita por transformações unitárias $\hat{\rho}(t) = U(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) U^\dagger(t, t_0)$, onde $U(t, t_0)$ é solução de $i\hbar \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{U}]$

Postulados

Por razões didáticas, os postulados foram primeiro apresentados em termos de vetores de estado. Porém, introduzido o formalismo (mais geral) de operadores densidades, é possível reescrever os postulados no novo formalismo, como indicado abaixo

Postulados resumidos da mecânica quântica (versão op. densidade)

1. O *estado de um sistema* físico é descrito pelo **operador densidade** $\hat{\rho} \equiv \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|$, em um espaço de Hilbert complexo.
2. Medidas de **observáveis** físicos são representadas por *operadores Hermitianos* $\hat{A} = \hat{A}^\dagger = \sum_{i,j} A_{ij} |i\rangle \langle j|$.
3. Os possíveis *resultados de uma medida* são **autovalores** do operador (observável) correspondente.
4. A **probabilidade** de medir m em uma medida \hat{M}_m de um sistema físico no estado $\hat{\rho}$ é dada por $p_m = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{M}_m)$.
5. O **estado pós medida** é dado por $\hat{\rho}_m = \frac{\hat{M}_m \hat{\rho} \hat{M}_m^\dagger}{\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{M}_m)}$.
6. A **evolução temporal** de um sistema quântico fechado é descrita por transformações unitárias aplicadas no operador densidade $\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0)$, onde $\hat{U}(t, t_0)$ é solução de $\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{U}]$.

Vetor de Bloch

Para um sistema de dois níveis (espaço de Hilbert de dimensão 2), sempre é possível escrever o operador densidade na forma

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \vec{r} \cdot \vec{\sigma}),$$

onde o vetor $\vec{r} = (r_x, r_y, r_z)$ é chamado de **vetor de Bloch** e representa o estado do sistema. O vetor $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ é um vetor composto pelas matrizes de Pauli

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

As componentes do vetor de Bloch são dadas por

$$r_x = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{\sigma}_x); \quad r_y = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{\sigma}_y); \quad r_z = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{\sigma}_z),$$

e a magnitude do vetor \vec{r} mede a pureza do estado

$$\|\vec{r}\| \leq 1 \quad \begin{cases} \|\vec{r}\| = 1 \rightarrow \text{estado puro} \\ \|\vec{r}\| < 1 \rightarrow \text{estado mistura} \end{cases}$$

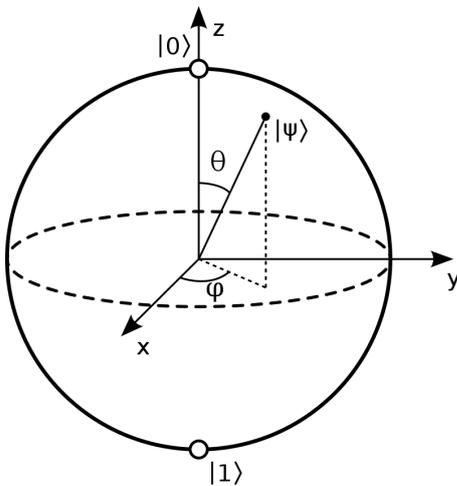


Figura 1: Esfera de Bloch, com um vetor de Bloch representando o estado $|\psi\rangle$. Estados puros correspondem aos pontos na superfície da esfera de raio unitário, enquanto pontos internos representam estados de mistura (não puros).

Essa abstração adicional, fornecida pelo vetor de Bloch, fornece um mapa que permite representar qualquer estado (puro ou mistura) de um espaço \mathcal{H}^2 de Hilbert de dimensão 2 espandido (pois inclui *mixed states*, que não são vetores do espaço \mathcal{H}^2) através de um mapa $\mathcal{H}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$, em termos de um vetor no \mathbb{R}^3 . Esse “homeomorfismo” é útil para visualizar processos e protocolos quânticos envolvendo qualquer sistema físico de dois níveis. Alguns exemplos bem conhecidos são: q-bits, spin-1/2, polarização de fótons, átomos de 2-níveis, etc.