

Universidade Federal de Minas Gerais
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS

Aplicações da geometria ao estudo do
emaranhamento

Bárbara Lopes Amaral

Orientador: Marcelo de Oliveira Terra Cunha

Belo Horizonte-MG

2006

Bárbara Lopes Amaral

Aplicações da geometria ao estudo do emaranhamento

Monografia apresentada como parte da inscrição para a Jornada de Iniciação Científica no IMPA de 2006, elaborada sob a orientação do Prof. Marcelo de Oliveira Terra Cunha.

**Belo Horizonte-MG
2006**

Resumo

Nesse trabalho, apresentamos o conceito de emaranhamento utilizando uma formulação geométrica da mecânica quântica. Abordamos o grau de liberdade de spin de três sistemas físicos diferentes e seus espaços de fase, enfatizando a relação entre características físicas e propriedades geométricas.

Introdução

O emaranhamento é uma propriedade intrínseca de sistemas quânticos compostos. É um conceito difícil de se explicar com palavras, que surgiu em 1935 como parte de discussões sobre fundamentos de mecânica quântica. Com o surgimento da teoria quântica da informação, o emaranhamento passou a ser visto como um recurso a ser utilizado, e daí vem o interesse de muitos pesquisadores em estudá-lo. É ele que está por trás de fenômenos interessantes, como a teleportação quântica, e do algoritmo de Shor, capaz de fatorar números inteiros em tempo polinomial (em um computador quântico).

Nosso propósito é estudar as propriedades geométricas do emaranhamento, em um exemplo simples, que é o sistema quântico de duas partículas de spin $\frac{1}{2}$, ou de dois *qubits*. Para isso, utilizamos então uma formulação geométrica da mecânica quântica, chamada *Mecânica Quântica Geométrica*.

A mecânica quântica geométrica é uma formulação da teoria quântica diferente da forma usual em que ela é proposta. Nessa nova formulação, os estados quânticos de um sistema são representados em um espaço projetivo complexo em que é utilizada a métrica de Fubini-Study. Ela afirma que as características físicas de um sistema podem ser representadas por propriedades geométricas neste espaço projetivo. Mas essa é uma via de mão dupla: qualquer propriedade geométrica especial desse espaço representa uma característica física na descrição quântica do sistema.

Aqui apresentaremos como exemplos dessa conexão entre geometria e características físicas os graus de liberdade de spin de alguns sistemas mais simples. Primeiramente, veremos os sistemas de uma partícula de spin $1/2$ e o sistema de uma partícula de spin 1 , que ainda não apresentam emaranhamento, já que são constituídos de apenas *uma parte*. Entender esses sistemas é importante porque assim podemos compreender melhor os sistemas compostos e a teoria que vamos utilizar para descrevê-los. Com toda a estrutura matemática desenvolvida, trataremos então dos sistemas compostos e da caracterização geométrica do emaranhamento.

Começaremos nosso estudo apresentando no capítulo 1 um objeto matemático de grande utilidade para a descrição desses sistemas: a Fibração de Hopf. No

capítulo dois, falamos sobre os fundamentos da mecânica quântica geométrica de maneira geral. Esses capítulos são independentes, e o leitor pode escolher a ordem que preferir. O capítulo 3 utiliza o que foi visto nos capítulos anteriores para estudar o sistema quântico de uma partícula de spin $1/2$, de uma partícula de spin 1 e por fim o sistema de duas partículas de spin $1/2$ no qual aparece o de emaranhamento.

Índice

1	A Fibrção de Hopf	1
1.1	Grupos	1
1.2	Grupos Matriciais	3
1.2.1	Matrizes Ortogonais	4
1.2.2	Matrizes Ortogonais Especiais	4
1.2.3	O Isomorfismo $\mathcal{C} \rightarrow SO(2)$	5
1.3	Os Quatérnions \mathbb{H}	6
1.4	O mapa $R_r : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$	8
1.5	Ação de \mathcal{H} em \mathbb{R}^3	9
1.6	O mapa de Hopf	11
1.7	Fibrção de Hopf, quatérnions e rotações	11
2	A Mecânica Quântica Geométrica	14
2.1	Espaços de Hilbert	14
2.2	Os postulados da mecânica quântica	16
2.3	A notação de Dirac e o espaço dual	20
2.4	A notação de índices	20
2.5	Formulação geométrica da teoria quântica	21
2.6	Distâncias e probabilidades	23
2.7	O Spin	25
3	Spin, geometria e emaranhamento	26
3.1	Uma partícula de spin 1/2	26
3.2	Sistemas de partículas idênticas	29
3.3	Spin 1	30
3.4	Emaranhamento	32
3.4.1	A geometria do emaranhamento	33
3.4.2	O Produto de Segre	34

Capítulo 1

A Fibração de Hopf

A *fibração de Hopf* foi estudado inicialmente por Heinz Hopf em 1931, e é muito útil em algumas aplicações em física. Em matemática, a fibração de Hopf foi uma grande descoberta em topologia e é fundamental na teoria dos grupos de Lie. Entre suas aplicações físicas estão a mecânica de corpos rígidos e a teoria quântica da informação. Aqui apresentaremos uma introdução a esse assunto utilizando teoria de grupos e álgebra linear. Falaremos um pouco sobre grupos, para que o leitor não familiarizado possa compreender o restante do texto, e também sobre grupos matriciais e os quatérnions, que são a base da abordagem que damos à fibração de Hopf .

Antes de discutirmos a fibração de Hopf vamos ver os conceitos fundamentais da teoria de grupos. Esse é um assunto fascinante, mas não podemos fazer um estudo detalhado dele aqui. Para quem quiser aprender um pouco mais, indicamos as referências [5] e [6].

1.1 Grupos

Seja G um conjunto no qual está definida uma operação binária, isto é, uma operação que a cada par ordenado de elementos do conjunto associa um outro elemento do conjunto. Essa operação será chamada genericamente de *multiplicação* e o elemento associado a um par de elementos (a,b) de *produto* ab , embora essa operação possa ser de qualquer tipo, como por exemplo soma e multiplicação de números, de matrizes e composição de funções. Dizemos que G é um grupo se as seguintes propriedades forem satisfeitas:

1. A operação é associativa:

$$\text{Se } a, b, c \in G, \text{ então } (ab)c = a(bc);$$

2. Existe o elemento neutro na operação, ou seja, existe um elemento $e \in G$ tal que:

$$ae = ea = a \quad \forall a \in G;$$

3. Existem os inversos, ou seja, para todo elemento $a \in G$ existe um outro elemento que denotaremos por $a^{-1} \in G$ tal que:

$$aa^{-1} = a^{-1}a = e.$$

Como exemplos e contra-exemplos de grupos, podemos citar alguns conjuntos familiares :

- O conjunto dos números inteiros, \mathbb{Z} , é um grupo com a operação de adição. Como sabemos, essa operação é associativa, o elemento neutro (identidade) é o zero e o inverso de um elemento a é $-a$.
- Em relação à multiplicação, \mathbb{Z} não é um grupo. A operação é associativa, 1 é o elemento neutro, mas a propriedade 3 não é satisfeita. Por exemplo, não existe nenhum elemento a em \mathbb{Z} tal que $2a = 1$.
- O conjunto dos números complexos diferentes de zero, $\mathbb{C} - \{0\}$ é um grupo com a operação de multiplicação em \mathbb{C} .
- As permutações de um conjunto $X = \{1, 2, \dots, n\}$, que são funções bijetivas de X em X , formam um grupo com a operação de composição de funções. A identidade é a função que leva cada elemento de X a ele mesmo. A associatividade é satisfeita porque composições de bijeções são associativas e os inversos existem porque toda bijeção é inversível.

Um subgrupo H de um grupo G é um subconjunto de G que, com a operação de G , é ele próprio um grupo. O conjunto dos números pares $2\mathbb{Z}$ é um subgrupo de \mathbb{Z} com a operação de adição. Como a operação é a mesma de \mathbb{Z} , ela é obviamente associativa. Além disso, a soma de dois números pares é um número par, a identidade de \mathbb{Z} é par e o inverso de um número par é par o que caracteriza $2\mathbb{Z}$ como um subgrupo de \mathbb{Z} .

O círculo unitário \mathcal{C} no plano complexo \mathbb{C} (os números complexos de módulo um), é um subgrupo de $\mathbb{C} - \{0\}$ com a operação de multiplicação em \mathbb{C} . Se $z, w \in \mathcal{C}$ então $|zw| = |z||w| = 1$, de modo que $zw \in \mathcal{C}$. A identidade é o número 1 que pertence a \mathcal{C} e o inverso de z é $1/z$ e como $|1/z| = |1|/|z| = 1$, z^{-1} também pertence a \mathcal{C} .

Podemos também definir funções entre grupos, assim como são definidas funções entre conjuntos numéricos. Esses grupos podem ser muito diferentes e a operação não precisa ser a mesma nos dois. Algumas dessas funções podem ter características especiais que são fundamentais para a teoria de grupos e por isso elas recebem nomes especiais.

Se G e H são grupos, uma função $\varphi : G \rightarrow H$ é chamada de *homomorfismo* de G em H se ela preserva a operação entre os grupos:

$$\text{Se } a, b \in G, \text{ então } \varphi(ab) = \varphi(a)\varphi(b).$$

Um homomorfismo é sobrejetivo quando $\varphi(G) = H$ e é injetivo se $\varphi(a) = \varphi(b)$ sempre implica que $a = b$. Se um homomorfismo é sobrejetivo e injetivo ele é chamado de *isomorfismo*.

Quando existe um isomorfismo entre dois grupos, dizemos que eles são *isomorfos*. Dois grupos isomorfos possuem a mesma estrutura de grupo, isto é, os elementos se combinam da mesma maneira em ambos, não importando qual “nome” damos para os elementos de cada um e de como é definida a operação. Nesse sentido, dois grupos isomorfos são essencialmente *o mesmo grupo*. Isso pode ser útil em alguns casos; veremos mais adiante que um isomorfismo nos permite trabalhar com rotações em \mathbb{R}^2 utilizando o grupo \mathcal{C} .

1.2 Grupos Matriciais

O conjunto de todas as matrizes de entradas reais¹ $n \times n$ invertíveis (com determinante diferente de zero) formam um grupo por multiplicação de matrizes, chamado de *grupo linear geral*, denotado $GL(n)$. A multiplicação de matrizes é uma operação associativa, a matriz identidade I_n é o elemento neutro da operação e cada matriz A no conjunto possui uma inversa A^{-1} . As matrizes que fazem parte de $GL(n)$ definem transformações lineares de $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. Assumimos que o leitor esteja familiarizado com os conceitos de álgebra linear, e indicamos as referências [4] e [7] para uma discussão mais aprofundada sobre o assunto. Aqui, concentraremos nossa atenção em definir alguns subgrupos de $GL(n)$ e suas propriedades que serão fundamentais mais tarde.

¹Em geral, o conjunto de matrizes invertíveis sobre um dado corpo k forma um grupo por multiplicação de matrizes, denotado por $GL(n, k)$ mas aqui nos concentraremos no caso real.

1.2.1 Matrizes Ortogonais

Uma matriz A $n \times n$ é dita ortogonal quando $A^T A = I_n$. Para que isso aconteça as colunas de A devem formar um conjunto ortonormal de vetores, isto é:

$$a_{1i}a_{1j} + a_{2i}a_{2j} + \cdots + a_{ni}a_{nj} = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j, \\ 0 & \text{se } i \neq j. \end{cases} \quad (1.1)$$

O produto de duas matrizes ortogonais A e B também é uma matriz ortogonal: $(AB)^T(AB) = B^T A^T AB = B^T (A^T A) B = B^T B = I_n$. A identidade é obviamente uma matriz ortogonal e a inversa de uma matriz ortogonal é a sua transposta, que também é ortogonal já que $(A^T A) = (A A^T)^T = (I_n)^T = I_n$. Como vimos essas condições implicam que o conjunto dessas matrizes é um subgrupo de $GL(n)$. Esse subgrupo é denotado por $O(n)$.

Uma propriedade importante das transformações lineares definidas pelas matrizes de $O(n)$, e que resulta da definição, é que elas preservam o produto interno de vetores em \mathbb{R}^n . Daí segue que elas preservam a norma dos vetores e também as distâncias e os ângulos entre eles.

Essas propriedades fazem com que $O(n)$ seja um grupo muito importante: ele é o grupo formado pelas matrizes de rotação e reflexão \mathbb{R}^n (e de combinações de reflexões e rotações que não podem ser representadas como uma rotação ou uma reflexão apenas, chamadas roto-reflexões). Podemos entender o papel fundamental de $O(n)$ em muitas aplicações: rotações e reflexões aparecem o tempo todo em qualquer área da física.

1.2.2 Matrizes Ortogonais Especiais

O determinante de uma matriz ortogonal pode assumir apenas dois valores: ± 1 , o que é simples verificar:

$$1 = \det(I_n) = \det(A^T A) = \det(A^T) \det(A) = (\det(A))^2.$$

Os elementos de $O(n)$ que tem o determinante igual a um formam um subgrupo, como pode ser facilmente verificado, chamado de *grupo ortogonal especial* e denotado por $SO(n)$. O fato do determinante ser um implica que as matrizes de $SO(n)$ representam as rotações, enquanto que $O(n) - SO(n)$ (que não é um grupo!) é o conjunto das reflexões e das roto-reflexões.

O fato de $SO(n)$ representar as rotações é o motivo pelo qual ele é importante para a compreensão da fibração de Hopf e pelo qual ele é importante para várias outras aplicações como por exemplo a mecânica de corpos rígidos.

1.2.3 O Isomorfismo $\mathcal{C} \rightarrow SO(2)$

Para motivar a conexão feita entre os quatérnions, $SO(3)$ e a fibração de Hopf, mostramos como podemos associar os números complexos de módulo um, chamados complexos unitários, a rotações de \mathbb{R}^2 . Se um número complexo z possui módulo um, ele pode ser escrito na forma:

$$z = \cos(\theta) + i\text{sen}(\theta),$$

ou em forma exponencial:

$$z = e^{i\theta}.$$

Podemos construir um mapa $S : \mathcal{C} \rightarrow SO(2)$ da seguinte forma:

$$S(\cos(\theta) + i\text{sen}(\theta)) = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\text{sen}(\theta) \\ \text{sen}(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}.$$

A partir dessa definição é fácil verificar que $S(\cos(\theta) + i\text{sen}(\theta)) \in SO(2)$, e que cada elemento de $SO(2)$ pode ser escrito como $S(\cos(\varphi) + i\text{sen}(\varphi))$ para algum φ , o que implica que o mapa é sobrejetivo. Ele também é um mapa injetivo, pois dada uma matriz em $SO(2)$, os valores de $\cos(\theta)$ e $\text{sen}(\theta)$ ficam unicamente determinados, o que também determina unicamente o complexo unitário cuja imagem é essa matriz.

Além disso, o mapa preserva a operação entre grupos pois:

$$S(e^{i\varphi}e^{i\theta}) = \begin{pmatrix} \cos(\theta + \varphi) & -\text{sen}(\theta + \varphi) \\ \text{sen}(\theta + \varphi) & \cos(\theta + \varphi) \end{pmatrix}$$

e por outro lado,

$$\begin{aligned} S(e^{i\theta})S(e^{i\varphi}) &= \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\text{sen}(\theta) \\ \text{sen}(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\text{sen}(\varphi) \\ \text{sen}(\varphi) & \cos(\varphi) \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\theta + \varphi) & -\text{sen}(\theta + \varphi) \\ \text{sen}(\theta + \varphi) & \cos(\theta + \varphi) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

de modo que $S(e^{i\theta}e^{i\varphi}) = S(e^{i\theta})S(e^{i\varphi})$ e $S : \mathcal{C} \rightarrow SO(2)$ é um isomorfismo. Isso quer dizer que as rotações de \mathbb{R}^2 podem ser codificadas tanto através de matrizes 2×2 quanto através de números complexos de módulo um. A composição de duas rotações pode ser entendida como a multiplicação dos números complexos que correspondem a cada uma delas.

Inspirado por esse isomorfismo, o matemático William Rowan Hamilton passou anos tentando construir uma álgebra com triplas ordenadas de números reais, análoga à multiplicação de números complexos, que pudesse levar a uma maneira simples de representar as rotações de \mathbb{R}^3 . No entanto, não foi possível fazer tal construção. Hamilton percebeu que seu problema só poderia ser resolvido se ele utilizasse quatro números reais, ao invés de três, o que o levou a invenção dos *quatérnions*, na metade do século dezenove.

1.3 Os Quatérnions \mathbb{H}

Como um conjunto (e como um espaço vetorial) a construção feita por Hamilton é idêntica a \mathbb{R}^4 . Veremos suas principais características, aquelas que serão importantes para entendermos sua relação com as rotações. A maioria das propriedades apresentadas são resultados de cálculos simples, mas muito longos e enfadonhos para serem colocados aqui. Deixamos para o leitor verificar cada afirmação feita e prosseguimos com o texto enfatizando o que é mais importante para nossos propósitos.

Um quatérnion é uma expressão do tipo:

$$r = a + bi + cj + dk,$$

em que a, b, c, d são números reais. O número a é a *parte real* de r e b, c, d são análogos à *parte imaginária* dos números complexos.

Em \mathbb{H} queremos definir uma operação de *adição* e uma operação de *multiplicação*. Para isso, podemos tratar os quatérnions como polinômios em i, j e k . Dessa forma a soma de dois quatérnions $r = a + bi + cj + dk$ e $s = x + yi + zj + wk$ é:

$$r + s = (a + x) + (b + y)i + (c + z)j + (d + w)k.$$

A multiplicação pode ser definida considerando válida a seguinte tabela de multiplicação:

$$\begin{array}{c|c|c|c|c} 1 & 1 & i & j & k \\ i & i & -1 & k & -j \\ j & j & -k & -1 & i \\ k & k & j & -i & -1 \end{array}.$$

Assim o produto de r e s é:

$$rs = (ax - by - cz - dw) + (ay + bx + cw - dz)i + (az + cx + dy + bw)j + (aw + dx + bz - cy)k, \quad (1.2)$$

como pode ser facilmente calculado utilizando as relações da tabela.

Pode-se mostrar que a multiplicação se distribui sobre a adição, isto é, se temos três quatérnions r, s, t , então

$$r(s + t) = rs + rt \quad \text{e} \quad (r + s)t = rt + st.$$

Assim como em \mathbb{C} , podemos fazer algumas definições em \mathbb{H} que facilitarão os cálculos que envolvem elementos desse conjunto. Por exemplo, podemos definir o conjugado \bar{r} do quatérnion r :

$$\bar{r} = a - bi - cj - dk.$$

Também podemos definir a norma $|r|$ de r :

$$|r| = \sqrt{a^2 + b^2 + c^2 + d^2},$$

que pode ser igualmente expressa por:

$$|r| = \sqrt{r\bar{r}}.$$

Os quatérnions não nulos (aqueles diferentes do quatérnion $0 = 0 + 0i + 0j + 0k$) formam um grupo com a multiplicação definida por (1.2), que denotaremos por \mathbb{H}^* . Essa é uma operação associativa pois se $r, s, t \in \mathbb{H}^*$, então $(rs)t = r(st)$. Cada quatérnion r em \mathbb{H}^* possui um inverso multiplicativo $r^{-1} = \frac{\bar{r}}{|r|}$ e o quatérnion 1 é a identidade.

Os conjuntos \mathbb{C} e \mathbb{H} são muito semelhantes, pois muitas operações e propriedades são definidas e utilizadas da mesma forma nos dois. Entretanto existe uma diferença fundamental entre eles: a operação de multiplicação em \mathbb{C} é comutativa, enquanto que a operação de multiplicação em \mathbb{H} não é. Um quatérnion só comuta com todos os demais se ele for real, isto é, tiver parte imaginária igual a zero.

A norma do produto de dois quatérnions r e s pode ser calculada facilmente utilizando a eq. (1.2). Realizando este cálculo verifica-se que $|rs| = |r||s|$. Essa propriedade garante que sempre que multiplicamos dois quatérnions unitários, isto é, dois quatérnions de norma igual a um, obtemos outro quatérnion unitário. Como a identidade 1 é obviamente um quatérnion unitário e o inverso de um quatérnion unitário também o é, o conjunto $\mathcal{H} = \{r \in \mathbb{H}; |r| = 1\}$ é um subgrupo de \mathbb{H}^* .

Outro conceito importante é o de *quatérnion puro*. Um quatérnion é dito puro quando sua parte real é igual a zero. Se r é um quatérnion arbitrário e p é um quatérnion puro é fácil verificar que o produto rpr^{-1} também é um quatérnion puro p' . Esse resultado é muito interessante e será utilizado em breve.

Vale ressaltar também que os quatérnions puros formam um espaço vetorial real. Não é difícil ver que combinação linear com coeficientes reais de quatérnions puros é também quatérnion puro.

Vistas as principais propriedades dos quatérnions, nos preocuparemos a partir de agora em mostrar como eles podem ser associados a rotações de \mathbb{R}^3 . Aqui o conceito de *quatérnion unitário* será de grande importância, assim como foi importante o conceito de *complexo unitário* na associação entre rotações em \mathbb{R}^2 e números complexos.

1.4 O mapa $R_r : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$

Podemos construir um mapa $R_r : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ utilizando um dado quatérnio r . Para isso associamos cada ponto $p = \begin{pmatrix} x & y & z \end{pmatrix}$ de \mathbb{R}^3 a um quatérnio puro $p = xi + yj + zk$. Como vimos, o produto rpr^{-1} também será um quatérnio puro, e portanto também corresponderá a um ponto $p' = \begin{pmatrix} x' & y' & z' \end{pmatrix}$ de \mathbb{R}^3 . Definimos, então, R_r da seguinte forma:

$$R_r(p) = rpr^{-1}.$$

Quatérnios diferentes nem sempre definem mapas diferentes. Se um quatérnio s é obtido pela multiplicação de um quatérnio r por um quatérnio α com parte imaginária igual a zero, os mapas R_s e R_r são os mesmos:

$$R_{\alpha r}(p) = (\alpha r)p(r^{-1}(1/\alpha)) = rpr^{-1} = R_r(p).$$

Essa propriedade nos permite sempre escolher um quatérnio unitário para definir o mapa.

O mapa R_r é um mapa linear, pois a multiplicação se distribui sobre a adição e o produto entre um quatérnio qualquer e um número real (quatérnio com parte imaginária igual a zero) é comutativo. Assim, se α e β são reais e p e q são dois quatérnios puros, temos que:

$$R_r(\alpha p + \beta q) = r(\alpha p + \beta q)r^{-1} = r\alpha pr^{-1} + r\beta qr^{-1} = \alpha rpr^{-1} + \beta rqr^{-1} = \alpha R_r(p) + \beta R_r(q).$$

O fato de R_r ser um mapa linear nos permite representá-lo através de uma matriz, que pode ser encontrada se calcularmos as imagens dos vetores da base canônica,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

por R_r . Procedendo dessa maneira obtemos:

$$R_r = \begin{pmatrix} 1 - 2(c^2 + d^2) & 2(bc - ad) & 2(bd + ac) \\ 2(bc + ad) & 1 - 2(b^2 + d^2) & 2(cd - ab) \\ 2(bd - ac) & 2(cd + ab) & 1 - 2(c^2 + b^2) \end{pmatrix}$$

em que a, b, c, d são as componentes do quatérnio r .

Agora chegamos exatamente onde queríamos: a matriz R_r pertence a $SO(3)$ e isso nos fornece um meio de codificar rotações em quatérnios unitários! Resta saber se podemos encontrar um isomorfismo entre \mathcal{H} e $SO(3)$. Uma maneira natural de procurar por um isomorfismo é defini-lo como $\varphi : \mathcal{H} \rightarrow SO(3)$ tal que $\varphi(r) = R_r$.

Esse é um mapa que preserva a operação. Se temos dois quatérnions unitários r e s o mapa $R_r \circ R_s$ é igual ao mapa R_{rs} . Isso significa que a composição de rotações pode ser feita através da multiplicação dos quatérnions correspondentes.

Cada matriz de $SO(3)$ pode ser escrita como R_r para algum quatérnion r , basta escolher os valores adequados das componentes a, b, c e d . Isso garante que φ é uma função sobrejetiva. Mas observando a matriz que representa R_r podemos ver que essas componentes aparecem sempre multiplicadas duas a duas, de modo que uma mudança de sinal em todas elas não afetará o resultado de φ , como era de se esperar pois dois quatérnions que são múltiplos um do outro definem o mesmo mapa. Assim, φ não é injetiva e obtemos apenas um homomorfismo entre \mathcal{H} e $SO(3)$.

Dado um quatérnion unitário r , podemos nos perguntar qual rotação ele define. Para responder a essa pergunta, devemos ser capazes de dizer qual é o eixo de rotação de R_r e qual é o ângulo de rotação.

Calculando os autovalores e autovetores de R_r , vemos que o vetor $(b \ c \ d)$ é um autovetor com autovalor um e portanto é o eixo de rotação, o que responde metade de nossa pergunta. Para encontrar o ângulo de rotação θ basta calcularmos o ângulo entre um vetor perpendicular ao eixo de rotação e sua imagem:

$$\cos(\theta) = \frac{\mathbf{w} \cdot R_r(\mathbf{w})}{\|\mathbf{w}\|},$$

e dessa forma encontramos que $\cos(\theta) = 2a^2 - 1$.

1.5 Ação de \mathcal{H} em \mathbb{R}^3

Cabe aqui uma discussão a respeito de *ação de grupos*. A definição de ação de grupos é um conceito simples que “captura” uma idéia bem intuitiva.

Seja G um grupo, X um conjunto e S_X o conjunto de todas as permutações de X (funções bijetivas de X em X). Como já mencionamos, S_X é um grupo com a operação de composição de funções. Uma ação de G em X é um homomorfismo entre G e S_X .

Vejamos o que isso significa. Seja $\varphi : G \rightarrow S_X$ um homomorfismo. Cada elemento $g \in G$ é levado a uma permutação φ_g . Se g e h são elementos de G , então a permutação φ_{gh} associada ao produto gh é a composição $\varphi_g \circ \varphi_h$. Podemos dizer que os elementos de G permutam os elementos de X de uma maneira que é compatível com a estrutura algébrica de G .

Essas idéias se tornam mais claras quando as aplicamos a um caso específico. Por exemplo, o grupo de números inteiros \mathbb{Z} age na reta real \mathbb{R}

transladando a reta. Cada inteiro n leva um número real x a $n + x$ e portanto, define uma translação φ_n . É fácil mostrar que isso é realmente uma ação, já que:

$$\varphi_{m+n}(x) = (m + n) + x = m + (n + x) = \varphi_m \circ \varphi_n(x),$$

de modo que temos um homomorfismo entre \mathbb{Z} e $S_{\mathbb{R}}$.

Um mesmo grupo G pode agir de diversas formas em um mesmo conjunto X . No exemplo anterior, poderíamos também definir a ação em que cada número inteiro n leva um número real x a $(-1)^n x$. Assim cada inteiro par corresponde à identidade e cada inteiro ímpar corresponde à reflexão da reta em torno do ponto 0.

Em uma ação de um grupo G em um conjunto X que associa a cada elemento de $g \in G$ uma permutação φ_g , definimos a órbita de um elemento x em X como o conjunto

$$orb_G(x) = \{\varphi_g(x); g \in G\},$$

ou seja, o conjunto de todas as imagens de x pelas permutações definidas pelos elementos de G . No primeiro exemplo, a órbita de $x \in \mathbb{R}$ é $\{x + n; n \in \mathbb{Z}\}$ e no segundo é $\{x, -x\}$.

O *estabilizador* de x é o conjunto

$$stab_G(x) = \{g \in G; \varphi_g(x) = x\},$$

que é o conjunto dos elementos de G que definem permutações que fixam x . Voltando aos exemplos, no primeiro o estabilizador de todos os elementos é o subgrupo trivial de $S_{\mathbb{R}}$, que consiste na identidade apenas, e no segundo $stab_G(X) = 2\mathbb{Z}$ se $x \neq 0$ e $stab_G(0) = \mathbb{Z}$.

De que maneira todas essas definições estão relacionadas com o que vimos até agora? A resposta para essa pergunta está no fato de que podemos associar cada quatérnio a uma rotação (que é uma permutação de \mathbb{R}^3) através de um homomorfismo. Dessa maneira cada quatérnio r age em \mathbb{R}^3 através do mapa R_r .

Como as rotações preservam o comprimento dos vetores, a órbita de cada vetor v em \mathbb{R}^3 é o conjunto de todos os vetores que têm a mesma norma de v , ou seja, é a esfera em \mathbb{R}^3 que tem raio igual a norma de v . O estabilizador de v é o conjunto dos quatérnios que definem rotações cujo eixo é paralelo a v , ou seja, são os quatérnios que satisfazem

$$(b \ c \ d) = \lambda v.$$

Em particular, estamos interessados na ação de \mathcal{H} em S^2 , a esfera unitária de \mathbb{R}^3 . Como vimos, a órbita de um ponto em S^2 é toda S^2 . Essa ação nos permitirá estudar com detalhes o *mapa de Hopf*.

1.6 O mapa de Hopf

Um espaço fibrado E é definido por um mapa de E a outro espaço D , chamado de espaço base, de modo que cada conjunto de pontos em uma fibra F é levado a um mesmo ponto em D . Utilizamos a representação $F \hookrightarrow E \rightarrow D$. Uma fibração é dita trivial se $E = F \times D$.

Em algumas fibrações, o conjunto E é uma esfera unitária de n dimensões, que é o conjunto de pontos $(x_0 \ x_1 \ \cdots \ x_n)$ em \mathbb{R}^{n+1} que satisfazem:

$$x_0^2 + x_1^2 + \cdots + x_n^2 = 1.$$

Geometricamente, S^n é o conjunto de pontos cuja distância à origem é um. S^1 é o círculo no plano de centro na origem e raio um e S^2 é a esfera em \mathbb{R}^3 de centro na origem e raio um.

O exemplo mais simples de uma fibração não trivial é a *fibração de Hopf* de S^3 por círculos máximos S^1 , cujo espaço base é S^2 . Ela é definida pelo *mapa de Hopf* $h : S^3 \rightarrow S^2$ dado por:

$$h \left(\begin{matrix} a & b & c & d \end{matrix} \right) = \left(\begin{matrix} a^2 + b^2 - c^2 - d^2 & 2(ad + bc) & 2(bd - ac) \end{matrix} \right).$$

O mapa proposto por Hopf originalmente difere do que apresentamos acima por uma reordenação de coordenadas. Vamos usar essa outra versão para podermos abordar a fibração de Hopf através de quatérnions.

1.7 Fibração de Hopf, quatérnions e rotações

Um quatérnion r pode ser pensado como um vetor em \mathbb{R}^4 se identificarmos $1, i, j, k$ como os vetores

$$\left(\begin{matrix} 1 & 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right), \left(\begin{matrix} 0 & 1 & 0 & 0 \end{matrix} \right), \left(\begin{matrix} 0 & 0 & 1 & 0 \end{matrix} \right), \left(\begin{matrix} 0 & 0 & 0 & 1 \end{matrix} \right),$$

respectivamente. Assim, o vetor associado a um quatérnion $r = a+bi+cj+dk$ é

$$\left(\begin{matrix} a & b & c & d \end{matrix} \right).$$

Para entendermos como os quatérnions estão relacionados com a fibração de Hopf, inicialmente escolhemos um ponto p_0 em \mathbb{R}^3 ; p_0 pode ser qualquer ponto, mas vamos escolher $p_0 = \left(\begin{matrix} 1 & 0 & 0 \end{matrix} \right)$ para facilitar as contas.

Seja um ponto $P = \left(\begin{matrix} a & b & c & d \end{matrix} \right)$ em S^3 e $r = a+bi+cj+dk$ o quatérnion associado a ele. Esse quatérnion, como vimos, define um rotação R_r em \mathbb{R}^3 . A fibração de Hopf leva o ponto P à imagem de p_0 por R_r :

$$h(P) = R_r(p_0) = rp_0r^{-1},$$

já que:

$$R_r(p_0) = \begin{pmatrix} 1 - 2(c^2 + d^2) & 2(bc - ad) & 2(bd + ac) \\ 2(bc + ad) & 1 - 2(b^2 + d^2) & 2(cd - ab) \\ 2(bd - ac) & 2(cd + ab) & 1 - 2(c^2 + b^2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - 2(c^2 + d^2) \\ 2(bc + ad) \\ 2(bd - ac) \end{pmatrix}$$

que é justamente a imagem de r pela fibração de Hopf. Isso é interessante porque nos fornece uma maneira simples de entender o mapa de Hopf. Essa ligação entre quatérnions e a fibração de Hopf é que nos permitirá encontrar as *fibras de Hopf*, que são as pré-imagens de um ponto em S^2 .

Consideremos agora o ponto p_0 em S^2 . O conjunto C de pontos de S^3 que são levados a p_0 pela fibração de Hopf são os que satisfazem as relações:

$$1 - 2(c^2 + d^2) = 1,$$

$$2(ad + bc) = 0,$$

$$2(bc - ad) = 0.$$

Uma outra forma de encontrar os valores de a, b, c e d é lembrar que os pontos de S^3 que são levados a p_0 são aqueles cujos quatérnions associados definem rotações que deixam p_0 fixo. Isto significa que o eixo de rotação de R_r está na direção de p_0 . Assim temos

$$(b \ c \ d) = (\lambda \ 0 \ 0),$$

o que implica que $c = 0 = d$. Qualquer rotação definida por um quatérnion que satisfaça essa condição fixa p_0 . Temos então uma infinidade de possibilidades para r , pois temos infinitas escolhas para o ângulo de rotação. De fato, quaisquer valores de a e b são possíveis, desde que $a^2 + b^2 = 1$. Podemos então parametrizar C da seguinte forma:

$$C = (\cos t \ \sin t \ 0 \ 0).$$

Então a fibra de Hopf sobre p_0 é um círculo unitário em \mathbb{R}^4 .

A fibra sobre o ponto $(-1 \ 0 \ 0)$ também pode ser facilmente encontrada. Nesse caso, as condições que devem ser satisfeitas são:

$$1 - 2(c^2 + d^2) = -1,$$

$$2(ad + bc) = 0,$$

$$2(bc - ad) = 0.$$

Assim, temos $c^2 + d^2 = 1$ e $a = b = 0$, de modo que a fibra sobre $(-1 \ 0 \ 0)$ é o círculo parametrizado por:

$$C' = (0 \ 0 \ \cos t \ \sin t).$$

Para encontrar a fibra sobre um ponto qualquer $p = (x \ y \ z)$ em S^2 , temos que encontrar quais rotações levam o ponto p_0 em p .

Primeiro vejamos como podemos levar um dado ponto $A \in S^2$ em um outro ponto $B \in S^2$. Geometricamente, podemos pensar da seguinte forma: tomando um arco de um círculo AB , que passa pelos dois pontos, podemos observar que qualquer rotação que leva A a B deve ter seu eixo de rotação cortando o círculo que bissecciona o arco AB . Em um desse eixos é fácil encontrar o ângulo de rotação: se o eixo passa pelo ponto médio de AB , o ângulo de rotação é 180° .

Consideremos a rotação descrita acima e os pontos p_0 e p . Vamos encontrar quais os valores de a, b, c, d para o quatérnion r_1 que define essa rotação. Como o ângulo de rotação é 180° , segue que $a = 0$. O eixo de rotação passa pelo ponto médio da reta que liga esses dois pontos, o ponto $((x+1)/2 \ y/2 \ z/2)$ e pela origem. Com isso podemos encontrar o autovetor $(b \ c \ d)$. Com esse cálculos concluímos que o quatérnion r_1 é:

$$r_1 = \frac{1}{\sqrt{2(x+1)}}((1+x)i + yj + zk).$$

A pré-imagem do ponto p é então o círculo C_p que pode ser parametrizado da forma:

$$C_p = r_1 e^{it},$$

e é fácil verificar que qualquer ponto pertencente a esse círculo é levado ao mesmo ponto em que é levado r_1 pelo mapa de Hopf.

Assim, encontramos a fibra de Hopf sobre qualquer ponto em S^2 , com o auxílio do homomorfismo entre os quatérnions unitários e as rotações de \mathbb{R}^3 .

Essas fibras, círculos máximos em S^3 , têm um papel importante para a informação quântica. Mais adiante vamos ver qual é esse papel e que vantagens a utilização da fibração de Hopf pode nos trazer. Agora, passaremos ao estudo dos sistemas físicos, considerando primeiramente a mecânica quântica geométrica de uma forma geral e em seguida aplicando-a aos casos particulares que nos interessam.

Capítulo 2

A Mecânica Quântica Geométrica

Como já dissemos, a mecânica quântica geométrica é uma nova formulação da teoria quântica, em que características físicas e propriedades geométricas estão intimamente relacionadas. Antes de discutirmos os aspectos gerais da mecânica quântica geométrica, veremos como a teoria quântica é comumente apresentada. A primeira coisa de que precisamos para descrever matematicamente um sistema físico é um objeto que represente um determinado estado do sistema. Para sabermos quais são os objetos matemáticos que descrevem sistemas quânticos, vejamos primeiro algumas definições.

2.1 Espaços de Hilbert

Os espaços de Hilbert são um tipo muito especial de espaço vetorial. Especial porque matematicamente eles obedecem condições que são especiais. É especial porque toda teoria quântica é geralmente contruída utilizando os espaços de Hilbert como “arena”. Veremos nessa seção quais são essas propriedades matemáticas especiais, e na próxima veremos a relação dos espaços de Hilbert com a mecânica quântica.

Um espaço métrico M é um espaço vetorial sobre um corpo ¹ k em que podemos definir uma função $D : M \times M \rightarrow k$ chamada métrica (ou distância), que obedece às seguintes condições:

$$\forall x, y, z \in M,$$

- $D(x, y) \geq 0$ e $D(x, y) = 0 \iff x = y$;

¹O leitor pouco familiarizado com a noção de corpo pode se concentrar em exemplos como \mathbb{R} e \mathbb{C} .

- $D(x, y) = D(y, x)$;
- $D(x, y) \leq D(x, z) + D(z, y)$.

Tomemos uma seqüência de elementos desse espaço M . Denotaremos tal seqüência por $\{x_n\}_{n \in \mathbb{N}}$, em que cada $x_n \in M$. Dizemos que a seqüência é convergente, e que converge para o valor $a \in M$, se $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = a$. Isso quer dizer que:

$$\forall \epsilon > 0 \quad \exists \quad n_0; \quad n > n_0 \Rightarrow a - \epsilon < x_n < a + \epsilon.$$

Uma seqüência em M é chamada de *seqüência de Cauchy* se para todo $\epsilon > 0$ existe $n_0 \in \mathbb{N}$ tal que $m, n > n_0$ implica que $|x_m - x_n| < \epsilon$.

O que acontece, intuitivamente, é que em uma seqüência de Cauchy os elementos x_n vão ficando cada vez mais próximos uns dos outros a medida que n cresce. Isso difere da definição de limite de uma seqüência, que exige que os elementos se tornem cada vez mais próximos de um ponto fixo.

Não é difícil mostrar que toda seqüência convergente em M é uma seqüência de Cauchy.² No entanto, nem sempre uma seqüência de Cauchy é convergente. Um clássico exemplo é o de uma seqüência de números racionais que converge para um número irracional (como $\{x_1 = 1, x_2 = 1,4, x_3 = 1,41, x_4 = 1,414, \dots\}$ que converge para $\sqrt{2}$). Sendo uma seqüência convergente em \mathbb{R} , ela será uma seqüência de Cauchy em \mathbb{Q} , mas que não converge em \mathbb{Q} .

Se toda seqüência de Cauchy em M é uma seqüência convergente, dizemos que M é um espaço métrico completo.

Outra propriedade de alguns espaços vetoriais é que podemos definir um mapa de $V \times V \rightarrow k$ (em que V é o espaço vetorial e k o corpo sobre o qual ele é definido), chamado *produto interno* ou *produto escalar* de dois vetores v e u de V e denotado por (v, u) , que satisfaz às propriedades:

sejam u, v, w pertencentes ao espaço vetorial V e α pertencente ao corpo de V ,

- $(u, u) \geq 0$ e $(u, u) = 0 \iff u = 0$;
- $(u, v) = \overline{(v, u)}$;
- $(u, v + w) = (u, v) + (u, w)$;
- $\alpha(u, v) = (u, \alpha v)$;

²Ver por exemplo a referência [12].

em que a barra denota conjugação. No caso de $k = \mathbb{C}$ ela é importante pois implica que o produto interno não é comutativo, o que acontece no caso de $k = \mathbb{R}$ porque o conjugado de um número real é igual a ele próprio. Quando o produto interno pode ser definido, V é chamado de espaço vetorial com produto interno.

Dizemos que um espaço vetorial é um *espaço de Hilbert* se ele é um espaço métrico completo com produto interno.

É sobre esse tipo de espaço vetorial que a mecânica quântica se constrói. O produto interno tem um importante papel nessa construção porque está relacionado com as probabilidades de se obter um resultado em uma medição de alguma informação a respeito do sistema.

2.2 Os postulados da mecânica quântica

A mecânica quântica é um modelo que oferece a estrutura matemática para a descrição de um sistema físico. Ela não diz quais são as leis que um determinado sistema deve obedecer, mas fornece uma base para o desenvolvimento dessas leis.

É desejável que uma teoria física comece com um conjunto de postulados, a partir dos quais é possível derivar várias conseqüências que podem ser confirmadas pela experimentação. Vamos apresentar aqui os principais postulados da mecânica quântica.

POSTULADO 1: Associado a todo sistema quântico isolado existe um espaço métrico complexo completo com produto interno, isto é, um espaço de Hilbert complexo, chamado *espaço de estados* do sistema. Os estados possíveis desse sistema são representados matematicamente por vetores unitários nesse espaço.

Estes vetores, chamados *vetores de estado*, descrevem completamente o sistema. A partir deles podemos obter todas as informações possíveis a respeito do sistema. Vale lembrar que essas informações são probabilidades: a mecânica quântica é uma teoria probabilística! Veremos isso com mais detalhes adiante quando tratarmos de medições de uma determinada grandeza física.

POSTULADO 2: A evolução temporal de um sistema descrito pelo vetor de estado ψ é dada pela *equação de Schrödinger*:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = H\psi(t),$$

em que H é chamado de *operador Hamiltoniano* e \hbar é a constante de Planck.

O operador Hamiltoniano representa a energia total do sistema. No caso de uma partícula em um espaço com coordenada \vec{r} o Hamiltoniano representa a soma das energias cinética e potencial e a equação de Schrödinger pode ser escrita na forma:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \phi(\vec{r}, t) \right) \psi(\vec{r}, t)$$

ou

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + \phi(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

em que m é a massa da partícula e $\phi(\vec{r}, t)$ é o potencial ao qual ela está submetida.

Geralmente podemos resolver essa equação utilizando o método de separação de variáveis, supondo que ψ é o produto de um termo que depende apenas do tempo e de um termo que depende apenas das coordenadas espaciais. A equação diferencial obtida para a parte espacial é chamada de *equação de Schrödinger independente do tempo*, e é uma equação de autovalores para o operador Hamiltoniano. Quando encontramos as possíveis soluções dessa equação, encontramos os *auto-estados* do sistema, que são autovetores do operador Hamiltoniano. Os auto-estados formam uma base para o espaço de estados do sistema. Isso acontece porque o operador Hamiltoniano é hermitiano³, e sempre podemos construir uma base para o espaço vetorial formada por autovetores de um operador hermitiano. Dessa forma todos os estados possíveis do sistema são combinações lineares desses auto-estados.

No entanto, a equação de Schrödinger sozinha não determina os auto-estados completamente. É preciso lembrar que os vetores de estado são vetores unitários, e por isso a equação de Schrödinger deve sempre vir acompanhada da condição de normalização: $(\psi, \psi) = 1$ para qualquer autoestado. Essa condição de normalização está relacionada à interpretação probabilística dos vetores de estado.

POSTULADO 3: Cada observável, ou seja, qualquer característica física do sistema que pode ser medida, é representado por um operador linear hermitiano que age no espaço de estados do sistema. Os possíveis resultados de uma medição de um observável são os autovalores do operador que o representa.⁴

Um operador hermitiano A é um operador que tem a propriedade de que $(Av_1, v_2) = (v_1, Av_2)$, para quaisquer dois vetores v_1 e v_2 do espaço vetorial.

³Os operadores hermitianos são também chamados de *auto-adjuntos*.

⁴Consideramos o caso em que não há autovetores degenerados.

Em termos de matrizes, isso significa que $A = A^\dagger$, em que $A^\dagger = \overline{(A^T)}$ é a transposta conjugada de A . Como mencionamos anteriormente, sempre é possível construir uma base para o espaço vetorial com autovetores de um operador hermitiano. Dessa forma, sempre podemos construir uma base ortornormal para o espaço de estados do sistema com autovetores de um observável. Então cada estado possível ψ pode ser escrito como combinação linear de autovetores u_i de um dado observável:

$$\psi = \sum_{i=1}^n c_i u_i,$$

em que $c_i = (u_i, \psi)$ e n é a dimensão do espaço de estados do sistema.

A interpretação que é dada aos coeficientes c_i é essencial para a descrição do sistema e mostra a importância do produto interno. Esses coeficientes estão relacionados com as probabilidades dos resultados possíveis de uma medição. Seja a_i o autovalor associado ao autovetor u_i do observável A . Então $|c_i|^2$ é a probabilidade de se obter a_i em uma medição de A , e por isso esses coeficientes são chamados de *amplitudes de probabilidade*. É daí que vem a necessidade da condição de normalização que acompanha a equação de Schrödinger. Assim, para qualquer estado ψ , $\sum_{i=1}^n |c_i|^2 = 1$.

Uma das características singulares da mecânica quântica é o fato de que quando medimos um observável modificamos o sistema em que a medição é realizada. Esse fato não está relacionado com problemas na medição: mesmo em um experimento ideal essa modificação ocorreria.

Em mecânica clássica podemos realizar qualquer medida sem alterar o estado do sistema. Em quântica, se obtivermos como resultado da medição o autovalor a_i , então o estado do sistema após a medição é o autovetor u_i correspondente a a_i . A mecânica quântica não diz nada a respeito de como ocorre essa transição. Tudo que podemos saber é a probabilidade de que ψ passe para um dado autoestado u_i , que é $|c_i|^2$.

Consideremos agora dois estados ψ e $e^{i\theta}\psi$. Se as amplitudes do primeiro estado são c_i , então as do segundo estado são $e^{i\theta}c_i$. A probabilidade de se obter um autovalor a_i é igual para os dois estados: $|e^{i\theta}c_i|^2 = e^{i\theta}e^{-i\theta}|c_i|^2 = |c_i|^2$. Esse resultado pode ser generalizado: qualquer característica física depende apenas de $|c_i|^2$. Como as amplitudes de probabilidades não são quantidades que podem ser medidas, ψ e $e^{i\theta}\psi$ representam o mesmo estado físico.

Um outro postulado importante é o que determina qual é o espaço de estados de um sistema composto, dados os espaços de estados dos sistemas individuais.

POSTULADO 4: O espaço de estados de um sistema composto é o *produto tensorial* do espaço de estados de cada um dos sistemas individuais.

O produto tensorial é uma maneira de “juntarmos” espaços vetoriais para formarmos outro espaço vetorial “maior”.

Sejam V e U os espaços de estado de dois sistemas físicos individuais. Se as dimensões desses espaços forem m e n , então o produto tensorial $V \otimes U$ é um espaço vetorial de dimensão mn . Por definição, o produto tensorial satisfaz às seguintes propriedades:

- Para um escalar arbitrário z e elementos v de V e u de U ,

$$z(v \otimes u) = (zv) \otimes u = v \otimes (zu);$$

- Para v_1 e v_2 arbitrários em V e u em U ,

$$(v_1 + v_2) \otimes u = v_1 \otimes u + v_2 \otimes u;$$

- Para v arbitrário em V e u_1 e u_2 em U ,

$$v \otimes (u_1 + u_2) = v \otimes u_1 + v \otimes u_2.$$

Se $\{v_i\}$ é uma base para V e $\{u_i\}$ é uma base para U , então $\{v_i \otimes u_j\} = \{v_1 \otimes u_1, v_1 \otimes u_2, \dots, v_1 \otimes u_n, \dots, v_m \otimes u_1, \dots, v_m \otimes u_n\}$ é uma base para $V \otimes U$.

O produto tensorial entre os espaços de estados é uma característica da mecânica quântica que a diferencia da mecânica clássica, na qual o espaço de fase de um sistema composto é o *produto cartesiano* entre os espaços de fase dos sistemas individuais. Veremos que essa “novidade” está relacionada com a caracterização geométrica do emaranhamento, uma propriedade física puramente quântica do sistema composto.

Esses postulados formam a base da teoria quântica, sobre as quais são construídas as leis que regem o comportamento de um sistema físico. Por exemplo, se temos um elétron em uma caixa, não sabemos qual é exatamente a equação de Schrödinger que descreve sua evolução temporal, nem qual é exatamente o espaço de Hilbert associado a esse sistema. Mas sabemos que qualquer que seja a descrição dele, ela deve ser consistente com esses postulados.

Aqui nossa intenção é apresentar apenas um “resumo” dos principais pilares sobre os quais a mecânica quântica se constrói. Um estudo mais aprofundado pode ser feito através da referência [2] e das consagradas *Lectures de Feynman* [3].

Existem várias notações diferentes para o que apresentamos acima. A mais utilizada é a notação de Dirac, que é muito conveniente para esse tipo de tratamento. A seguir veremos essa notação e também o conceito de espaço dual e na seção seguinte uma outra notação, a notação de índices.

2.3 A notação de Dirac e o espaço dual

Como vimos anteriormente, um estado quântico é descrito por um vetor de estado que pertence a um espaço de Hilbert complexo, que a partir de agora passaremos a denotar por \mathcal{H} . Na notação de Dirac, um elemento de \mathcal{H} é denotado por um *ket* $|\psi\rangle$, por exemplo $|\psi\rangle$.

Um funcional linear é um mapa linear $\chi : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ que associa a cada *ket* $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ um número complexo que denotamos por $\chi|\psi\rangle$.

O conjunto desses funcionais lineares definidos em \mathcal{H} constitui um espaço vetorial chamado espaço dual \mathcal{H}^* . Os elementos de \mathcal{H}^* são denotados por um *bra* $\langle \chi|$, por exemplo $\langle \chi|$. Ao número obtido pela atuação de um *bra* $\langle \chi| \in \mathcal{H}^*$ em um *ket* $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ denotamos por $\langle \chi|\psi\rangle$.

O produto escalar de cada $|\psi\rangle$ por um dado $|\phi\rangle$ é um funcional linear que associa a cada $|\psi\rangle$ o número $(|\phi\rangle, |\psi\rangle)$. Denotamos esse funcional linear por $\langle \phi|$, e dessa forma o produto escalar $(|\phi\rangle, |\psi\rangle)$ equivale a $\langle \phi|\psi\rangle$. De certa forma, o que a notação faz é utilizar o isomorfismo entre um espaço e seu dual dado pela existência do produto escalar. O *bra* $\langle \phi|$ é o transposto conjugado de $|\phi\rangle$.

A notação de Dirac é muito prática e largamente utilizada em mecânica quântica. Uma outra notação um pouco diferente dessa, a notação de índices, é a que utilizaremos no restante do texto quando tratarmos da mecânica quântica geométrica. Ela pode parecer um pouco mais confusa a princípio, mas também é bastante prática. A matemática é a mesma; apenas a “cara” das coisas é que vai mudar.

2.4 A notação de índices

Na notação de Dirac, um vetor de estado é representado por um *ket* $|\psi\rangle$. Se escolhermos uma base para o espaço de estados do sistema, podemos expandir $|\psi\rangle$ nessa base da seguinte forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |u_i\rangle,$$

em que $|u_i\rangle$ são os vetores da base e $c_i = \langle u_i|\psi\rangle$ são as amplitudes de probabilidade.

De outra forma, podemos simplesmente escrever

$$\psi = \sum_{\alpha=1}^n \psi^\alpha u_\alpha,$$

com o índice α percorrendo todos os valores possíveis. Aqui as amplitudes de probabilidade são representadas por ψ^α e os vetores de estado da base por u_α .

Para entender melhor as duas maneiras de representar um vetor de estado, consideremos um sistema de dois níveis, ou seja um sistema cujo espaço de estados tem dimensão dois. Primeiro devemos escolher uma base para esse espaço, o que na notação de bra e ket seria escolher dois kets $|v_0\rangle$ e $|v_1\rangle$, por exemplo. Assim um estado ψ é dado por $|\psi\rangle = c_0|v_0\rangle + c_1|v_1\rangle$. Na outra notação, escolheríamos dois vetores v_0 e v_1 e teríamos $\psi = \psi^0 v_0 + \psi^1 v_1$, ou seja, o ψ^0 equivale ao c_0 da outra expressão, enquanto o ψ^1 equivale ao c_1 .

O passo seguinte é considerar a base fixa. Quando a base está fixa, cada vetor é unicamente determinado por suas componentes nessa base, ou seja, pelos coeficientes ψ^α , e podemos abreviar mais ainda a notação: cada vetor de estado ψ é indicado apenas por ψ^α , em que o índice α indica as componentes do vetor em relação a essa base. No entanto, devemos ter cuidado para não esquecer o que está implícito quando escrevemos ψ^α : a base fixa e o somatório no índice α .

Para denotar o conjugado de ψ^α , um bra, nesta notação utilizamos $\overline{\psi}_\alpha$. O somatório é considerado quando índices se repetem, de modo o produto escalar será denotado por $\overline{\phi}_\alpha \psi^\alpha$, em que novamente está implícito o somatório no índice α .

Essa notação também permite escrever outros objetos de forma compacta. Por exemplo, uma matriz que define uma transformação linear de \mathcal{H} em si próprio será representada por uma letra maiúscula com dois índices, um em cima e o outro em baixo. Por exemplo, consideremos a expressão $u^\alpha = M_\beta^\alpha v^\beta$. Nessa expressão temos uma matriz $(m)_{\alpha\beta}$ vezes um vetor v^β , o que resulta em um vetor u^α . Os vetores u e v “habitam o mesmo espaço”, e isso é indicado pelo fato de que as componentes de ambos têm índices em cima. Uma matriz que ao multiplicar um vetor v^β resulta em um vetor u^α precisa ter dois índices, e colocamos um índice em cima e outro em baixo. Os índices podem ser combinados de várias formas, e a cada combinação de índices pode ser atribuído um significado diferente.

2.5 Formulação geométrica da teoria quântica

Na formulação ortodoxa da mecânica quântica, o espaço de fase Hamiltoniano da mecânica clássica deve ser adequadamente submetido a um processo de quantização, o que origina uma outra estrutura, o espaço de Hilbert da mecânica quântica e o conjunto de operadores hermitianos que representam os observáveis físicos. Assim, o que acontece é que o problema é proposto

de um ponto de vista clássico, e em seguida faz-se um tratamento quântico, observando as diferenças entre as duas abordagens.

Em uma outra formulação, a *mecânica quântica geométrica* considera a teoria quântica independente da clássica: ela possui uma estrutura matemática intrínseca, que é o espaço de estados do sistema. O que se faz aqui é começar do sistema quântico e notar que na sua geometria há estruturas que lembram a dinâmica clássica.

Como vimos, um estado de um sistema quântico é representado por um vetor em um espaço de Hilbert \mathcal{H} , a menos de norma e fase global. Por isso não trabalhamos com os vetores de \mathcal{H} diretamente, mas com classes de equivalência:

$$\psi \longrightarrow e^{i\theta}\psi.$$

Por esta razão, dizemos que um estado do sistema é caracterizado por uma reta ⁵ passando pela origem em \mathcal{H} . O conjunto dessas retas é chamado de *espaço de Hilbert projetivo* \mathcal{PH} . Todas as características do sistema e as operações realizadas nele podem ser representadas em \mathcal{PH} diretamente.

Um elemento de \mathcal{PH} representa, portanto, um conjunto de vetores de \mathcal{H} cujas coordenadas são proporcionais. Assim, em um exemplo em que \mathcal{PH} tem dimensão três, podemos usar um vetor $(x, y, z) \in \mathcal{H}$ para indicar todo conjunto. Quando fazemos isso, usamos a notação $(x : y : z)$, que é chamada de *coordenadas homogêneas*.

Nesse espaço a equação de Schrödinger é substituída pela equação de Schrödinger projetiva :

$$i\hbar \left[\psi^\alpha \frac{\partial \psi^\beta}{\partial t} - \psi^\beta \frac{\partial \psi^\alpha}{\partial t} \right] = \psi^\alpha H_\gamma^\beta \psi^\gamma - \psi^\beta H_\gamma^\alpha \psi^\gamma.$$

Também podemos expressar essa equação de forma compacta escrevendo:

$$i\hbar \psi^{[\alpha} \frac{\partial \psi^{\beta]}{\partial t} = \psi^{[\alpha} H_\gamma^{\beta]} \psi^\gamma,$$

em que $[]$ denotam antissimetriação.

Quando a equação de Schrödinger é apresentada dessa forma, a equação de Schrödinger projetiva, ela é invariante por mudanças de fase global e norma em ψ^α e ela não precisa mais vir acompanhada da condição de normalização.

Uma das vantagens da formulação geométrica da teoria quântica é que ela permite que os estados do sistema e seus conjugados coexistam em um

⁵Como consideramos um espaço de Hilbert complexo, as retas em questão também serão complexas.

mesmo espaço. Em \mathcal{PH} podemos definir uma conjugação geométrica, de modo que o conjugado de um ponto $\psi^\alpha \in \mathcal{PH}$ é o conjunto dos pontos ϕ^α que satisfazem $\bar{\phi}_\alpha \psi^\alpha = 0$, ou seja, é o subespaço ortogonal a ψ^α , que chamaremos genericamente de hiperplano. O conjunto desses hiperplanos é o espaço dual \mathcal{PH}^* . Dessa maneira os pontos de \mathcal{PH}^* correspondem a hiperplanos em \mathcal{PH} e reciprocamente os pontos de \mathcal{PH} correspondem a hiperplanos em \mathcal{PH}^* . A conjugação geométrica determina uma correspondência hermitiana (semi-linear na primeira componente e linear na segunda), entre um ponto de \mathcal{PH} e o hiperplano ortogonal a ele.

De acordo com a mecânica quântica geométrica, todas as características físicas do sistema podem ser representadas geometricamente em \mathcal{PH} . Então, dados dois estados ψ^α e ϕ^α , existe uma forma de representarmos geometricamente a probabilidade de transição entre esses dois estados. Essa é uma outra vantagem dessa formulação: ela leva a uma maneira de relacionar a distância entre os dois vetores de estado e a probabilidade de transição entre esses estados.

2.6 Distâncias e probabilidades

A ligação entre distância e probabilidade de transição entre dois estados quânticos nos parece de certa forma intuitiva: se dois estados são representados por vetores “próximos” em \mathcal{PH} , eles devem ser “parecidos”, no sentido de que deve ser mais simples levar o sistema de um estado ao outro. De uma maneira informal, é exatamente isso que acontece; mas a noção de distância que deve ser usada está longe de ser trivial!

Consideremos inicialmente o conjunto de todas as superposições η^α de dois estados ψ^α e ϕ^α , ou seja, combinações lineares deles. Esse conjunto é a reta projetiva que liga esses dois estados em \mathcal{PH} , que pode ser representada por

$$\eta^\alpha = A\psi^\alpha + B\phi^\alpha,$$

em que A e $B \in \mathbb{C}$ e não são ambos nulos. Fisicamente, essa reta representa todas as possíveis superposições quânticas de ψ^α e ϕ^α .

Agora consideremos o produto escalar entre esses dois estados. Esse produto escalar define um ângulo, tal que:

$$\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{\bar{\phi}_\alpha \psi^\alpha \bar{\psi}_\beta \phi^\beta}{\bar{\psi}_\gamma \psi^\gamma \bar{\phi}_\delta \phi^\delta}.$$

Lembrando que o produto escalar é hermitiano, a expressão acima equiv-

ale à:

$$\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{|\overline{\phi}_\alpha \psi^\alpha|^2}{|\psi^\gamma|^2 |\phi^\delta|^2},$$

que é independente de norma e fase de ψ^α e ϕ^α .

O ângulo θ define uma distância entre esses estados em \mathcal{PH} e está relacionado com a probabilidade de transição entre esses estados da seguinte forma:

$$P_{\psi^\alpha \rightarrow \phi^\alpha} = \frac{1 + \cos(\theta)}{2}.$$

Se $\psi^\alpha = \phi^\alpha$, então $\theta = 0$ e se ψ^α é ortogonal à ϕ^α , então $\theta = \pi$ e a distância é máxima.

Façamos $\theta = ds$ e $\phi^\alpha = \psi^\alpha + d\psi^\alpha$ na equação acima. Fazendo então uma expansão do cosseno em torno de zero, obtemos dessa maneira a distância entre estados vizinhos:

$$ds^2 = \frac{8\psi^{[\alpha} d\psi^{\beta]} \overline{\psi}_{[\alpha} \overline{d\psi}_{\beta]}}{(\overline{\psi}_\gamma \psi^\gamma)^2}.$$

Essa expressão é conhecida como *métrica de Fubini-Study* e é ela que faz a conexão entre as noções de probabilidade e distância em um tratamento geométrico da mecânica quântica. A probabilidade de passarmos de um estado para outro é maior se a distância entre esses estados no espaço de estados é menor, sendo essa distância tomada com relação à métrica de Fubini-Study.

Com essa relação entre distância e probabilidade estabelecida, basta então conhecer o vetor de estado que descreve o sistema para que possam ser obtidas todas as informações possíveis a respeito dele. Se o que a mecânica quântica pode nos oferecer são probabilidades de transição, então tudo que precisamos saber são as distâncias entre os vetores de estado no espaço de fase!

A estrutura da mecânica quântica geométrica apresentada anteriormente é bem geral e deve valer para qualquer sistema físico. Para descrever um sistema, precisamos apenas especificar qual é o espaço de estados do sistema e a partir daí podemos conhecer tudo o que precisamos, lembrando sempre das regras que devem ser obedecidas.

Para vermos como tudo isso funciona em casos específicos, consideraremos agora um grau de liberdade particular de sistemas quânticos: o spin.

2.7 O Spin

Quando um feixe de átomos de hidrogênio no estado fundamental é submetido a um campo magnético externo não-homogêneo⁶, observa-se que ele se divide em dois. Essa observação contradiz o que se esperava quando resolvemos a equação de Schrödinger para esse átomo e indica que o elétron possui um grau de liberdade além dos três graus de liberdade espaciais: o spin.

O spin é uma característica puramente quântica, sem nenhum análogo clássico. Ele é um grau de liberdade intrínseco de partículas como elétrons e prótons, que se comporta ao interagir com campos magnéticos externos de maneira semelhante ao momento angular. O spin de uma partícula é caracterizado por um número inteiro ou semi-inteiro S e os auto-estados da partícula por um número no conjunto $\{-S, -S+1, -S+2, \dots, S-2, S-1, S\}$, chamado de m_s . O número quântico S define a dimensão do espaço de estados do sistema.

O sistema mais simples é o de uma partícula de spin $1/2$, que é o caso do elétron e do próton. Estudando esse sistema podemos entender melhor o spin e tudo o que discutimos anteriormente a respeito dos aspectos geométricos da mecânica quântica. Poderemos também ver com detalhes a matemática envolvida ao passarmos do espaço de Hilbert para o espaço de Hilbert projetivo e aí utilizaremos como uma importante ferramenta a fibração de Hopf.

⁶O campo magnético deve ser não-homogêneo porque a força sobre os átomos depende do seu gradiente, que em um caso de campo homogêneo seria igual a zero.

Capítulo 3

Spin, geometria e emaranhamento

3.1 Uma partícula de spin 1/2

Quando fazemos medições do spin de um elétron em uma dada direção, verificamos que existem dois valores possíveis, simétricos em relação a zero, que são indicados pelo número quântico m_s . Em um caso $m_s = 1/2$ e dizemos que o elétron está no estado ψ_+ . No outro, $m_s = -1/2$ e dizemos que o elétron está no estado ψ_- . Essas considerações valem para qualquer partícula de spin 1/2.

Sabemos que os valores possíveis para o resultado de uma medição de um determinado observável são os autovalores desse observável, e que uma base para o espaço de estados do sistema pode ser construída com seus autovetores. Portanto qualquer estado ψ de uma partícula de spin 1/2 pode ser escrito na forma:

$$\psi = a\psi_+ + b\psi_-,$$

em que a e b são números complexos.

As partículas de spin 1/2 são, portanto, *sistemas de dois níveis*, os chamados *qubits*. Mesmo sendo os sistemas quânticos mais simples, o interesse em estudá-los aumentou nos últimos anos devido à teoria quântica da informação. Isso acontece porque os qubits são os portadores da informação quântica, análogos aos bits da informação clássica, e para realizar as diferentes manipulações nesse sistema é necessário que conheçamos bem seu espaço de estados.

Fixada uma base, o estado de uma partícula de spin 1/2 é dado por dois números complexos. O espaço de estados desse sistema tem dimensão complexa dois, isto é, o espaço de estados é \mathbb{C}^2 , que como espaço topológico

equivale a \mathbb{R}^4 .

Notemos então que como os vetores de estado são vetores unitários, podemos nos restringir à esfera S^3 . Para levarmos em conta a fase global do vetor de estado, esperamos que de alguma maneira possamos preencher S^3 com círculos, que são as órbitas da fase, de modo que cada ponto em S^3 pertença a um único círculo. Assim poderemos trabalhar com as classes de equivalência

$$\psi \rightarrow e^{i\theta}\psi,$$

que mencionamos anteriormente. Essa tarefa é realizada pela fibração de Hopf.

Se temos um ponto $\psi \in S^3$, qualquer outro ponto da forma $e^{i\theta}\psi$ representa o mesmo estado físico que ψ . E qualquer ponto dessa forma será levado ao mesmo ponto em S^2 em que é levado ψ pela fibração de Hopf.

Dessa forma, podemos passar de S^3 a S^2 através da fibração de Hopf. Como espaço topológico, S^2 é equivalente a $\mathbb{C}\mathcal{P}^1$, que é o espaço projetivo complexo de uma partícula de spin 1/2. Os qubits são comumente descritos utilizando a esfera S^2 , que recebeu o nome especial de *esfera de Bloch*.

A esfera de Bloch é uma ferramenta poderosa na descrição de um qubit porque as coordenadas de um ponto sobre ela, que representa um estado do qubit, podem ser facilmente relacionadas com grandezas físicas importantes para a descrição do sistema. Para vermos isso vamos reformular o mapa de Hopf.

Uma outra forma de encontrar a fibração de Hopf analiticamente é através da composição do mapa h_1 de S^3 em \mathbb{R}^2 mais um ponto singular $\{\infty\}$ e o mapa h_2 , que é o inverso da projeção estereográfica.

A projeção estereográfica é um mapa que projeta a esfera S^2 no plano, com um ponto singular. Tomamos um ponto qualquer em S^2 , que escolheremos como sendo o ponto $p_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$. O plano que divide a esfera em dois hemisférios com p_0 em um dos pólos é o plano xy . É sobre esse plano que faremos a projeção da esfera.

A projeção estereográfica leva cada ponto $p = \begin{pmatrix} x & y & z \end{pmatrix}$ à interseção da reta que liga esse ponto e p_0 com o plano xy . Claramente, o ponto p_0 não tem imagem ordinária por esta projeção : não veríamos nenhuma sombra associada àquele ponto. Por isso temos o ponto singular na imagem do mapa.

A reta r que liga p e p_0 pode ser parametrizada da seguinte forma:

$$r = \begin{pmatrix} xt & yt & (z-1)t + 1 \end{pmatrix}.$$

A interseção $p' = \begin{pmatrix} x' & y' & z' \end{pmatrix}$ dessa reta com o plano xy pode ser encontrada fazendo-se $z' = 0$. Obtemos então $t = 1/(1-z)$, de modo que

$$p' = \begin{pmatrix} \frac{x}{(1-z)} & \frac{y}{(1-z)} & 0 \end{pmatrix}.$$

Pode-se verificar facilmente que o mapa inverso da projeção estereográfica $h_2 : \mathbb{R}^2 + \{\infty\} \rightarrow S^2$ é dado por:

$$h_2 \left(\begin{matrix} r & s \end{matrix} \right) = \frac{1}{r^2 + s^2 + 1} \left(\begin{matrix} 2r & 2s & r^2 + s^2 - 1 \end{matrix} \right).$$

Vamos considerar um ponto em \mathbb{C}^2 , dado por $(\alpha \ \beta)$ em que $\alpha = a + bi$ e $\beta = c + di$. Esse ponto equivale a um ponto p em \mathbb{R}^4 dado pelas coordenadas $p = (a \ b \ c \ d)$. Se α e β satisfazem a condição $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, então p estará em S^3 .

Seja então $p \in S^3$, como dito acima. Definimos o mapa¹ $h_1 : S^3 \rightarrow \mathbb{R}^2 + \{\infty\}$ da seguinte maneira:

$$h_1 \left(\begin{matrix} a & b & c & d \end{matrix} \right) = h_1 \left(\begin{matrix} \alpha & \beta \end{matrix} \right) = \frac{1}{c^2 + d^2} \left(\begin{matrix} ac + bd & ad - bc \end{matrix} \right)$$

Em seguida, aplicamos o mapa h_2 ao ponto obtido com a aplicação do mapa h_1 . Ao compormos h_1 e h_2 obtemos então o mapa de Hopf $h : S^3 \rightarrow S^2$:

$$h \left(\begin{matrix} a & b & c & d \end{matrix} \right) = \left(\begin{matrix} 2(ac + bd) & 2(ad - bc) & a^2 + b^2 - c^2 - d^2 \end{matrix} \right).$$

O primeiro mapa mostra claramente que um círculo máximo em S^3 , parametrizado por $(\alpha e^{i\theta} \ \beta e^{i\theta})$ é mapeado no mesmo ponto em $\mathbb{R}^2 + \{\infty\}$ e consequentemente no mesmo ponto de S^2 , a esfera de Bloch, pelo segundo mapa.

O mapa que obtivemos é um pouco diferente daquele que apresentamos anteriormente, mas as propriedades e sua utilidade permanecem iguais. A forma anterior foi utilizada para que fosse possível estudar o mapa através dos quatérnions. Essa outra forma do mapa de Hopf pode ser usada para vermos mais claramente a relação das coordenadas de um ponto na esfera de Bloch², que representa um estado ψ de uma partícula de spin 1/2, e os observáveis de spin nas direções x, y e z do sistema, que são representados como operadores pelas *matrizes de Pauli*:

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

Aqui, usamos como base os autovetores do operador σ_z .

As coordenadas na esfera de Bloch estão relacionadas com os *valores médios* ou *valores esperados* desses operadores. O valor médio $\langle A \rangle$ de um

¹Aqui há um abuso de linguagem, feito em nome da clareza.

²Na verdade, essa forma de apresentar a fibração de Hopf apenas nos permite escrever as matrizes dos operadores de spin na forma comumente encontrada na literatura.

operador A é a média dos valores obtidos em medições repetidas em um grande número de partículas, todas no mesmo estado ψ e pode ser encontrado da seguinte forma:

$$\langle A \rangle = (\psi, A\psi).$$

Dessa forma é fácil ver que as coordenadas de um estado ψ na esfera de Bloch satisfazem:

$$\begin{aligned} X &= \langle \sigma_x \rangle = 2\text{Re}(\bar{\alpha}\beta) \\ Y &= \langle \sigma_y \rangle = 2\text{Im}(\bar{\alpha}\beta) \\ Z &= \langle \sigma_z \rangle = (|\alpha|^2 - |\beta|^2), \end{aligned}$$

em que α e β são os coeficientes de expansão de ψ na base formada pelos autovetores de σ_z .

Esses resultados mostram como a esfera de Bloch é de grande utilidade. Valores esperados são quantidades importantes na descrição de um sistema quântico e eles podem ser encontrados facilmente para um qubit quando a utilizamos como espaço de estados.

Esse exemplo simples traz consigo uma fundamentação matemática rica e elegante. A medida que os sistemas passam a ser mais complexos, a matemática necessária para descrevê-los também se torna mais complexa. Entender a estrutura do espaço de estados de uma partícula de spin $1/2$ é importante porque podemos usar essa estrutura como base para a descrição de outros sistemas, como as partículas de spin 1 e sistemas de duas partículas de spin $1/2$.

3.2 Sistemas de partículas idênticas

Em um sistema de partículas idênticas, como dois elétrons em uma caixa, somos incapazes de distinguir essas partículas. Classicamente, isso é sempre possível: cada partícula pode ser identificada através de sua trajetória. Em uma descrição quântica, as partículas não possuem mais uma trajetória definida de modo que não somos mais capazes de dizer qual é qual.

Nossa descrição do sistema deve levar isso em conta, isto é, as informações que obtemos com nossa teoria devem ser independentes do fato de podermos distinguir as partículas. A maneira de fazermos isso matematicamente é construir um vetor de estado de modo que as probabilidades sejam invariantes pela troca das partículas. Duas possibilidades, que são as que ocorrem nos casos mais comuns e nos que vamos tratar aqui, são vetores de estado simétricos e anti-simétricos. Os vetores de estado simétricos permanecem invariantes por uma troca das partículas e são usadas na descrição de partículas com

spin inteiro, os *bosóns*. Já os vetores de estado anti-simétricos mudam de sinal por uma troca das partículas e são usados na descrição de partículas de spin semi-inteiro, os *férmions*. Em ambos os casos, as informações que podemos obter do sistema são invariantes por uma troca das partículas.

Consideremos então dois férmions de spin $1/2$, como os elétrons. Podemos considerar um vetor de estado que possa ser decomposto em duas partes, uma relativa ao grau de liberdade de spin e a outra relativa aos graus de liberdade espaciais. Esse vetor de estado deve ser anti-simétrico, e para isso cada uma das partes deve ter uma simetria bem definida: ou a parte de spin é simétrica e a parte espacial é anti-simétrica ou a parte de spin é anti-simétrica e a parte espacial é simétrica.³

Aqui estamos interessados em estudar apenas a parte relativa ao spin dos elétrons. Nesse caso existem três possibilidades simétricas:

$$\psi_s^1 = \psi_+^1 \psi_+^2,$$

$$\psi_s^2 = \psi_-^1 \psi_-^2$$

e

$$\psi_s^3 = \psi_+^1 \psi_-^2 + \psi_-^1 \psi_+^2.$$

em que a notação é a mesma utilizada na seção anterior. Quando o vetor de estado é simétrico, o sistema como um todo se comporta como uma partícula de spin 1, e geralmente esse fato é usado para descrever um sistema de duas partículas de spin $1/2$. Aqui faremos o contrário e descreveremos uma partícula de spin 1 usando estados simétricos do sistema de duas partículas de spin $1/2$. Após tratarmos esse caso, voltaremos ao sistema de duas partículas de spin $1/2$.

3.3 Spin 1

O espaço de Hilbert correspondente a este sistema tem três dimensões. A base é formada, portanto, por três autovetores, correspondentes aos autovalores -1 , 0 e 1 , que são os possíveis resultados de medições de spin em uma dada direção. O espaço de Hilbert projetivo é $\mathbb{C}\mathcal{P}^2$.

O estado de uma partícula de spin 1 será especificado através de um *spinor*, que denotaremos por Φ^{AB} . Esse spinor corresponde também a um

³ Essas não são as únicas possibilidades. Uma combinação linear de ambos também seria um vetor de estado possível. Por outro lado, mesmo tratando de estados puros, não há exigência de que existam a “parte de spin” e a “parte espacial”, justamente porque pode haver emaranhamento.

estado simétrico do sistema de duas partículas de spin 1/2. O spinor Φ^{AB} pode então ser escrito na forma:

$$\Phi^{AB} = \alpha^{(A}\beta^{B)},$$

em que $()$ denotam simetrização e em que α^A e β^B são estados de uma partícula de spin 1/2, que chamaremos de *spinors principais*.

Quando α^A e β^B são iguais, o spinor $\Phi_d^{AB} = \psi^A\psi^B$ é chamado de spinor degenerado. Associada aos spinors degenerados há uma cônica c em \mathbb{CP}^2 . A identificação dessa cônica é de grande utilidade para a construção do espaço de estados da partícula.

Essa cônica c pode ser vista como um mapa de \mathbb{CP}^1 a \mathbb{CP}^2 . Se $(t : u)$ são coordenadas homogêneas em \mathbb{CP}^1 então

$$c : (t : u) \longrightarrow (t^2 : tu : u^2)$$

em que $(t^2 : tu : u^2)$ são coordenadas homogêneas em \mathbb{CP}^2 . Esta parametrização leva \mathbb{CP}^1 à cônica c .

Por qualquer ponto em \mathbb{CP}^2 fora de c , passam duas retas tangentes a c . Os pontos de tangência determinam os spinors principais. Por exemplo, suponhamos que os pontos de tangência sejam $\Phi_d^{AB} = \alpha^A\alpha^B$ e $\Psi_d^{AB} = \beta^A\beta^B$. A reta que tangencia c em Φ_d^{AB} é a reta que contém os estados do tipo $\Phi^{AB} = \alpha^{(A}\mu^{B)}$ e a reta que tangencia c em Ψ_d^{AB} é a reta que contém os estados do tipo $\Psi^{AB} = \beta^{(A}\nu^{B)}$, em que os spinors principais μ^A e ν^A são os parâmetros para essas retas. A interseção dessas retas é o spinor $\Phi^{AB} = \alpha^{(A}\beta^{B)}$, ou seja, o ponto de \mathbb{C}^2 do qual partimos.

Nesse cenário, para determinarmos um spinor principal no espaço de estados da partícula, basta determinarmos um ponto em \mathbb{CP}^1 . Pelo fato de que a reta projetiva complexa corresponde à esfera S^2 , basta então especificarmos um ponto em S^2 , ou seja, um estado no espaço de estados de uma partícula de spin 1/2.

Quando aplicamos a um ponto P de c a operação de conjugação geométrica definida em \mathbb{CP}^2 , vemos que se conjugarmos P obteremos uma reta tangente à c . Esse ponto de tangência é chamado de conjugado de P . Dessa forma fica estabelecida uma correspondência hermitiana entre pares de pontos em c . Para um estado $\psi^A\psi^B$ a reta conjugada contém os estados do tipo $\lambda^A\bar{\psi}^B$, para λ^A arbitrário. O ponto de tangência entre essa linha e c é o ponto $\bar{\psi}^A\bar{\psi}^B$, que é o conjugado de $\psi^A\psi^B$.

A escolha de um ponto em c determina um eixo, uma direção na qual vamos medir o spin da partícula. Para qualquer eixo existem três valores possíveis que obteremos como resultado dessa medição: -1 , 0 e 1 . Se escolhermos o eixo correspondente ao estado $\psi^A\psi^B$, o autoestado correspondente

ao autovalor 1 é $\psi^A\psi^B$, o autoestado correspondente ao autovalor -1 é $\overline{\psi^A}\overline{\psi^B}$ e o autoestado com autovalor 0 é a interseção das retas que tangenciam c nesses pontos, $\psi^{(A}\overline{\psi^{B)}$.

Após realizada a medição do spin nessa direção, sabemos pelos postulados da mecânica quântica que o estado do sistema será um dos auto-estados que vimos acima. Nada podemos dizer a respeito de como essa transição de estados ocorre; podemos apenas dizer qual a probabilidade do estado do sistema passar a ser um dos três auto-estados. Isso é feito através da métrica de Fubini-Study: calculamos a distância entre o estado inicial e cada um dos auto-estados e dessa forma obtemos três ângulos θ_{+1} , θ_{-1} e θ_0 . As probabilidades de transição serão então dadas pela expressão:

$$P_{X \rightarrow u_i} = \frac{1 + \cos(\theta_i)}{2},$$

em que X é o estado inicial da partícula, u_i é um dos auto-estados e i é um dos valores 1, -1 ou 0.

Essa estrutura é suficiente para descrever completamente o espaço de estados de uma partícula de spin 1. O que vimos anteriormente para uma partícula de spin 1/2 é de grande importância para essa descrição, em especial a esfera de Bloch está ligada à cônica de spinores degenerados.

Com esse sistema pudemos observar de uma maneira simples todos os aspectos que havíamos mencionado a respeito da ligação entre geometria e características físicas da partícula, em especial a ligação entre distância e probabilidade. Nos falta ainda estudar uma outra característica puramente quântica dos sistemas de partículas, o emaranhamento. Para isso voltaremos a seguir ao sistema de duas partículas de spin 1/2.

3.4 Emaranhamento

Como dissemos, o emaranhamento é um conceito difícil de se explicar com palavras. Como é uma característica quântica, sem análogo clássico, ele pode nos parecer bem estranho a princípio, mas a medida que estudamos a respeito a noção de emaranhamento passa a ficar um pouco mais clara.

Uma maneira de definir o que é emaranhamento matematicamente é a seguinte: seja \mathcal{H} o espaço de estados relacionado a um sistema composto de duas partes; sabemos que esse espaço de estados é o produto tensorial dos espaços de estado \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 de cada um dos sistemas individuais. Um vetor de estado ψ em \mathcal{H} é dito fatorável se pode ser escrito na forma $\psi = \psi_1 \otimes \psi_2$ para algum $\psi_1 \in \mathcal{H}_1$ e algum $\psi_2 \in \mathcal{H}_2$; caso contrário, dizemos que ψ é um estado *emaranhado*.

O fato de que a “composição” de espaços de estados em mecânica quântica é feita através do produto tensorial está relacionada com a representação geométrica do emaranhamento. Se o espaço de estados do sistema composto fosse o produto cartesiano entre os espaços de estado dos sistemas individuais só teríamos estados do tipo fatorável. Mas como esse espaço é gerado pelo produto tensorial, surge a possibilidade de termos estados de outro tipo, os estados emaranhados.

3.4.1 A geometria do emaranhamento

Consideremos novamente os graus de liberdade de um sistema de duas partículas de spin $1/2$. O espaço de Hilbert associado a esse sistema tem dimensão quatro e o espaço de Hilbert projetivo é $\mathbb{C}\mathcal{P}^3$. Nesse espaço de estados a conjugação geométrica leva pontos a planos.

O estado singlete, de spin total igual a zero e cujo vetor de estado deve ser anti-simétrico é um ponto em $\mathbb{C}\mathcal{P}^3$, o ponto $Z = \psi^{[A}\phi^{B]}$. Aqui, como antes, os colchetes denotam anti-simetrização. O plano conjugado a esse ponto contém os estados de triplete, de spin total igual a um, que possuem exatamente a mesma descrição utilizada na seção anterior.

Em $\mathbb{C}\mathcal{P}^3$, o conjunto dos estados não-emaranhados $\psi^{AB} = \xi^A\eta^B$ é uma superfície quádrlica Q . Essa superfície tem correspondência com produto cartesiano dos espaços de estado individuais das partículas. Os estados fora dessa superfície são estados emaranhados.

Suponhamos que comecemos com um estado de spin total igual a zero $Z = \psi^{[A}\phi^{B]} = \psi^A\phi^B - \phi^A\psi^B$. Se medirmos o spin de uma das partículas elas irão se desemaranhar e o estado resultante estará em Q . A escolha do eixo em que será realizada a medição determina um ponto na cônica c que representa os estados de spinores degenerados no plano correspondente aos estados triplete, e conseqüentemente seu conjugado, que como vimos, também pertence a c . Vimos também que as tangentes à cônica nesses dois pontos se interceptam no estado triplete de autovalor zero $T = \psi^{(A}\phi^{B)} = \psi^A\phi^B + \phi^A\psi^B$ relativo a esse eixo. Se juntarmos esse ponto ao ponto inicial Z obteremos uma reta que interceptará a quádrlica em dois pontos.

Essa reta contém os pontos que são superposições de Z e T , que podem ser escritos na forma:

$$aZ + bT,$$

em que a e b são números complexos. A interseção com a quádrlica acontecerá no ponto em que $a = b$ e no ponto em que $a = -b$.

Como a quádrlica Q está relacionada ao produto cartesiano dos espaços de estado de cada uma das partículas, podemos então pensar em dois conjuntos

de *geradores*, cada um relativo a uma das partículas, o que corresponde ao fato de que a superfície é definida através de dois parâmetros. Tudo funcionaria da seguinte forma: um gerador relativo a uma partícula representa um estado fixo dessa partícula e cada ponto nesse gerador representa um possível estado da outra partícula (um gerador da partícula 1, por exemplo, seria o conjunto dos pontos da forma $\alpha^A\beta^B$, em que α é fixo e β percorre todos os estados possíveis da segunda partícula). Passando por um dado ponto de Q existem apenas um gerador de cada partícula, de modo que no estado do sistema representado por esse ponto a partícula 1 se encontra no estado definido pelo gerador relativo à partícula 1 e a partícula 2 se encontra no estado definido pelo gerador relativo à partícula 2.

Quando realizamos uma medição de spin em uma dada direção em uma das partículas, vimos que o estado do sistema após essa medição poderá ser um de dois pontos em Q , um para o qual $a = b$ e o outro para o qual $a = -b$. Esses pontos são tais que a interseção do gerador relativo a essa partícula que passa por esses pontos intercepta a cônica c nos pontos que definem o eixo de medição do spin: quando $a = b$, o estado da primeira partícula será ψ^A e quando $a = -b$ o estado da primeira partícula será ϕ^B .

Com essa estrutura, podemos descrever completamente o sistema de duas partículas de spin $1/2$. O que fizemos aqui foi encontrar uma maneira de descrever o espaço de Hilbert projetivo do sistema de duas partículas utilizando o espaço de Hilbert projetivo de uma única partícula. Uma construção semelhante à essa pode ser feita para outros sistemas compostos de duas partes. De maneira geral, o conceito de emaranhamento é caracterizado geometricamente pelo fato de que existe uma maneira de unir os espaços de Hilbert projetivos dos sistemas para formar o espaço de Hilbert projetivo do sistema composto. Essa maneira é chamada de *produto de Segre*.

3.4.2 O Produto de Segre

Para formar o espaço de Hilbert de um sistema composto a partir dos espaços de Hilbert dos subsistemas que o formam, sabemos que devemos utilizar o produto tensorial. No entanto, quando lidamos com os sistemas quânticos através dos espaços de Hilbert projetivos, devemos encontrar um modo de formar o espaço de Hilbert projetivo do sistema composto diretamente a partir dos espaços de Hilbert projetivos dos sistemas individuais.

Para fazermos isso devemos construir um produto entre espaços projetivos que gere também um espaço projetivo. Além disso, esse produto deve ser consistente com o produto tensorial dos espaços de Hilbert dos sistemas, isto é, o espaço de Hilbert projetivo que obtemos com esse produto deve ser o mesmo espaço projetivo que obtemos com a projetivização do produto

tensorial dos espaços de Hilbert dos subsistemas.

O produto entre espaços projetivos que obedece a essas condições é o produto de Segre, que é dado por:

$$\mathbb{C}\mathcal{P}^m \times \mathbb{C}\mathcal{P}^n \hookrightarrow \mathbb{C}\mathcal{P}^{(m+1)(n+1)-1},$$

em que $\mathbb{C}\mathcal{P}^m$ e $\mathbb{C}\mathcal{P}^n$ são os espaços de estado individuais relativos a cada um dos subsistemas e $\mathbb{C}\mathcal{P}^{(m+1)(n+1)-1}$ é o espaço de estados do sistema como um todo. Essa é uma característica peculiar da mecânica quântica.

Para verificarmos que esse produto é realmente consistente com o produto tensorial, suponhamos que temos dois sistemas cujos espaços de estado são \mathbb{C}^{m+1} e \mathbb{C}^{n+1} . O espaço de estados do sistema composto, como já sabemos, é $\mathbb{C}^{(m+1)(n+1)}$. Sabemos também que o projetivo relacionado ao primeiro subsistema é $\mathbb{C}\mathcal{P}^m$, o relativo ao segundo subsistema é $\mathbb{C}\mathcal{P}^n$ e o relativo ao sistema total é $\mathbb{C}\mathcal{P}^{(m+1)(n+1)-1}$, que é justamente o que nos fornece o produto de Segre.

Em mecânica clássica, o espaço de fase do sistema combinado é o produto cartesiano do espaço de fase de cada um dos subsistemas, que tem dimensão $(m+1) + (n+1)$, se a dimensão do espaço de fase dos subsistemas for $m+1$ e $n+1$. No caso de um sistema quântico o valor da dimensão do sistema total será $(m+1) + (n+1)$. Isso acontece porque em um sistema quântico teremos os estados emaranhados, além daqueles que resultam do produto cartesiano dos espaços dos subsistemas, e a dimensão do espaço de estados “cresce”.

O emaranhamento é uma característica surpreendente, mas ainda não se tem resposta para muitas perguntas. Uma delas é qual grandeza poderia quantificar quanto de emaranhamento há em um estado.

Assim, resta muito ainda para ser estudado. Problemas mais complexos que os sistemas apresentados aqui, com propriedades diferentes e com uma estrutura matemática ainda mais rica.

Conclusão

Com o objetivo inicial de estudar a geometria do emaranhamento pudemos estudar muitos conceitos diferentes de física e de matemática. Pudemos analisar detalhadamente o espaço de estados de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ e de uma partícula de spin 1, bem como os diversos conceitos matemáticos envolvidos aí. Daí então pudemos estudar as características geométricas e a estrutura matemática por trás do emaranhamento com a utilização de um exemplo simples, o sistema de duas partículas de spin $\frac{1}{2}$. Esse trabalho pode ser usado por físicos que queriam aprender um pouco mais da matemática da mecânica quântica e por matemáticos que queiram ver como podem ser muito interessantes as aplicações dadas para as teorias aparentemente tão abstratas criadas por eles.

Vemos que é possível, mesmo com poucos pré-requisitos, compreender os conceitos de física e de matemática envolvidos. A abordagem através de exemplos se mostra uma boa ferramenta didática, que possibilita o estudo de conceitos matemáticos usualmente adiados até mesmo de maneira infinita, mas que são acessíveis a estudantes ainda na graduação.

A importância de se estudar o emaranhamento é indiscutível. Além da sua importância teórica para a compreensão dos fundamentos da mecânica quântica, ele é uma característica extremamente útil para a computação e a informação quântica, e está no centro de todas as operações que podem ser realizadas.

Os exemplos discutidos acima são completamente entendidos. No entanto, o emaranhamento é um conceito que está longe de ser totalmente compreendido. A partir desse estudo, abre-se então um grande leque de futuras possibilidades. Por exemplo, pode-se estudar os estados puros de três qubits ou os estados mistos de dois qubits, que mostram várias outras características interessantes.

Referências Bibliográficas

- [1] M. A. Nielsen e I.L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [2] D. J.Griffths, *Introduction to Quantum Mechanics*, (Prentice Hall, 2004).
- [3] R. P. Feynman, R. B. Leighton e M. Sanders, *The Feynman Lectures on Physics*, vol 3 (1965).
- [4] E. L. Lima, *Álgebra linear*, (IMPA, 2004).
- [5] M. A Armstrong, *Groups and symmetry*, (New York,1988).
- [6] J. A Gallian, *Contemporary abstract algebra*, (Boston: Houghton Mifflin, 1998).
- [7] R. J. Santos , *Geometria analítica e álgebra linear* (Belo Horizonte, UFMG, Departamento de Matematica, 1998).
- [8] D. H. Lyons, *An Elementary Introduction to the Hopf Fibration* MATHEMATICS MAGAZINE, 2003 VOL. 76, NO. 2, APRIL 2003 87 .
- [9] D. C. Brody, L. P. Hughstone, *Geometric quantum mechanics*, J.Geom. Phys. 38, 19 (2001).
- [10] M. O. Terra Cunha, *Emaranhamento: caracterização, manipulação e conseqüências*, Tese de doutoramento (2005). Disponível em <http://www.mat.ufmg.br/~ terracunha>.
- [11] R. Mosseri, *Two and Three Qubits Geometry and Hopf Fibrations*, quant-ph/0310053 2003.
- [12] E. L. Lima, *Espaços Métricos*, (IMPA, 2005).