

## Um estudo sobre mecânica quântica e coerência quântica

### A study of quantum mechanics and quantum coherence

#### RESUMO

Eberson Taynan Tomazelli  
[ebersontomazelli@alunos.utfpr.edu.br](mailto:ebersontomazelli@alunos.utfpr.edu.br)

Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Toledo, Paraná, Brasil

Marcello Antonio Alves Talarico  
[marcello.talarico@gmail.com](mailto:marcello.talarico@gmail.com)

Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Toledo, Paraná, Brasil

A mecânica quântica é uma teoria física que rege partículas com massa muito pequena. É uma teoria popular pelas suas peculiaridades e estranhezas, e apresenta diversas características intrínsecas a sistemas físicos, como por exemplo o Princípio de Incerteza de Heisenberg, que descreve um limite de precisão com que certos pares de propriedades de uma partícula física podem ser conhecidos. Além disso, destaca-se a coerência quântica, uma propriedade fundamental na teoria quântica, e uma fonte física essencial para realização de tarefas em informação e computação quântica. Esta propriedade está associada com os elementos fora da diagonal principal da matriz densidade de um estado quântico com respeito a uma certa base de referência. A coerência quântica em um sistema possui várias métricas de quantificação, com destaque à medida de coerência norma- $l_1$ , devido a facilidade de calcular. O objetivo deste trabalho é apresentar conceitos básicos de mecânica quântica, bem como quantificar a coerência quântica com base na função de coerência norma- $l_1$ , aplicada a um sistema de dois *qubits* (*bits* quânticos).

**PALAVRAS-CHAVE:** Computação quântica. *Qubits*. Teoria quântica.

#### ABSTRACT

The quantum mechanics is a physics theory that rule particles with little mass. It is a theory famous for the peculiarities and strangeness, and show many characteristics intrinsic to physics systems, for example the Heisenberg uncertainty principle, that describes a limit of precision that certain pairs of proprieties from a physics particle can be unknown. Besides that, stand out the quantum coherence, a fundamental propriety in the quantum theory, and a physical source essential for the realization of tasks in quantum information and computation. This property is associated with the elements outside the main diagonal of the density matrix of a quantum state concerning to a certain base of reference. The quantum coherence inside a system have many metrics of quantification, with emphasis to the  $l_1$ -norm coherence measure, due the facility to calculate. The objective of this work is to show basic of quantum mechanics, as well as quantify the quantum coherence with base on the function of coherence norm- $l_1$ , applied to a system of two qubits (quantum bits).

**KEYWORDS:** Quantum computing. *Qubits*. Quantum theory.

**Recebido:** 19 ago. 2020.

**Aprovado:** 01 out. 2020.

**Direito autorial:** Este trabalho está licenciado sob os termos da Licença Creative Commons-Atribuição 4.0 Internacional.



## INTRODUÇÃO

A mecânica quântica é uma teoria que descreve leis físicas que regem partículas com massas muito pequenas, como por exemplo, átomos, elétrons e fótons (LOPES, 2017). Desde o seu nascimento com a correção da Catástrofe do Ultravioleta introduzida por Max Planck em 1901 e a sua caracterização elegante dos fenômenos da natureza, a mecânica quântica tem levantado grandes questionamentos contra intuitivos a respeito da visão clássica da física.

Uma teoria física popular pelas suas estranhezas e peculiaridades, a mecânica quântica apresenta diversas características intrínsecas a sistemas físicos, como por exemplo, o Princípio de Incerteza de Heisenberg, que descreve um limite na precisão com que certos pares de propriedades de uma partícula física podem ser conhecidos (EISBERG; RESNICK, 1979). De acordo com este princípio, não podemos medir com precisão simultaneamente a posição e o momento de uma partícula. Além disso, podemos citar também a coerência quântica, uma propriedade que está atrelada ao princípio da superposição de estados quânticos, além de estar relacionada com correlações quânticas (FERRARO et al., 2010), tal como o emaranhamento.

Como citado anteriormente, relacionada a correlações quântica, está a função coerência quântica. Assim como, energia é um recurso indispensável para a realização de trabalho, paralelamente, a coerência quântica é o combustível necessário para efetuar tarefas em computação e informação quântica, e está ligada diretamente a diversos fenômenos interessantes, com impactos abrangentes em Óptica Quântica, Física do Estado Sólido e Termodinâmica. Nos últimos anos, pesquisadores tem atraído interesse considerável, em desenvolver pesquisas sobre a presença e funcionalidade da coerência quântica em sistemas biológicos (HUELGA; PLENIO, 2013).

Mesmo a coerência quântica ser coadjuvante de fenômenos importantes em processos pertencentes a computação quântica, apenas recentemente foram dados os primeiros passos relevantes no sentido de desenvolver uma teoria rigorosa de coerência como um recurso físico, além da determinação de restrições necessárias para avaliar quantificadores de coerência. O objetivo desta pesquisa, é apresentar conceitos básicos de mecânica quântica ligados à computação quântica, bem como quantificar a coerência quântica baseada na função de Coerência Norma-11, aplicada a um sistema de dois *qubits* (bits quânticos).

## METODOLOGIA

Para amparar o leitor à ideia central desta pesquisa, faz-se necessário introduzir alguns conceitos fundamentais em mecânica quântica, uma teoria que se tem desenvolvido continuamente, desde a correção de Planck na catástrofe do ultravioleta, até o desenvolvimento avançado da computação quântica. Neste contexto, torna-se necessário recordar as concepções em relação a notação de Dirac, postulados, operador densidade, sistemas compostos e coerência quântica.

Nesta teoria, o estudo é probabilístico, logo, existe a necessidade de ter mais dimensões que as convencionais. Deste modo, Paul Dirac, desenvolveu uma nova notação matemática, denominando como notação de Dirac (NIELSEN; CHUANG, 2000). O Quadro 1 mostra a notação de Dirac e algumas propriedades.

Quadro 1 – Notação de Dirac e algumas propriedades

Propriedade	Vetor ket $ A\rangle$	Vetor bra $\langle B $
Soma de dois <i>kets</i> ou <i>bras</i>	$ A\rangle +  B\rangle =  C\rangle$	$\langle A  + \langle B  = \langle C $
Adição comutativa	$ A\rangle +  B\rangle =  B\rangle +  A\rangle$	$\langle A  + \langle B  = \langle B  + \langle A $
Adição associativa	$( A\rangle +  B\rangle) +  C\rangle =  A\rangle + ( B\rangle +  C\rangle)$	$(\langle A  + \langle B ) + \langle C  = \langle A  + (\langle B  + \langle C )$
Elemento neutro	$ A\rangle +  0\rangle =  A\rangle$	$\langle A  + \langle 0  = \langle A $
Elemento simétrico	$ A\rangle + (- A\rangle) =  0\rangle$	$\langle A  + (-\langle A ) = \langle 0 $
Multiplicação por um escalar $z \in \mathbb{C}$ é linear	$ zA\rangle = z A\rangle =  B\rangle$	$\langle zA  = \langle A z = \langle B $
Distributiva para $z, y \in \mathbb{C}$	$(z + y) A\rangle = z A\rangle + y B\rangle$ $z( A\rangle +  B\rangle) = z A\rangle + z B\rangle$	$\langle A (z + y) = \langle A z + \langle A y$ $(\langle A  + \langle B )z = \langle A z + \langle B z$
Conjugado Hermitiano	$ A\rangle^\dagger = ( A\rangle)^*{}^T$	$\langle A ^\dagger = (\langle A )^*{}^T$
Produto interno	$\langle A B\rangle = (\langle A )( B\rangle)$	
Produto externo	$( A\rangle)(\langle B ) =  A\rangle\langle B $	

Fonte: (YANOFSKY; MANNUCCI, 2008)

Para descrever os estados de um sistema físico, é adotado o postulado dos estados: o estado de um sistema físico é definido a partir da especificação de um vetor *ket* para vetores de estados normais  $|\Psi\rangle \in \mathbb{C}^n$  do espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$ . Todas as informações e as possíveis configurações de estados quânticos são contempladas por estes vetores de estado. O vetor *ket* pode ser representado matricialmente a partir da Eq. (1).

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^n \quad (1)$$

Para todo *ket*  $|a\rangle$  existe um vetor *bra dual* que é dado pela matriz transposta  $\langle a| = (a_1^* \ a_2^* \ \dots \ a_n^*)$ , em que,  $n$  denota a dimensão do espaço de Hilbert, segundo (NIELSEN; CHUANG, 2000).

A computação quântica é uma das áreas que pertence a mecânica quântica. Análogo ao *bit* da computação clássica “0” ou “1”, o *qubit* é um *bit* quântico, no entanto, pode assumir valores simultâneos, num estado de superposição (NIELSEN; CHUANG, 2000). A representação matemática do estado geral de um *qubit* é dada por:

$$|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (2)$$

Esse formalismo descrito anteriormente é válido, somente quando o *qubit* está em um estado bem definido ou estado puro. No entanto, quando ocorre a necessidade de uma mistura de estados, utilizamos um formalismo mais geral, denominado operador densidade  $\rho$  ou matriz densidade.

$$\rho = \sum_i \rho_i |u_i\rangle\langle u_i| \quad (3)$$

De acordo com a Eq. (3), observamos uma combinação linear de estados diferentes com probabilidades distintas  $\sum \rho_i |u_i\rangle$ , onde  $\sum_i \rho_i = 1$ . Neste caso, em que o operador densidade é dado em um estado misto, temos as propriedades  $\text{Tr}(\rho) = 1$ ,  $\rho = \rho^\dagger = \rho^{T*}$ ,  $\text{Tr}(\rho)^2 \leq 1$ ,  $\rho^2 \neq \rho$ ,  $0 \leq \text{Tr}(\rho)^2 \leq 1$  e  $\rho \geq 0$ .

Com base nesses conceitos e condições referente ao operador densidade, matematicamente temos que, os elementos da diagonal principal da matriz densidade nos dá as probabilidades de obter  $|\alpha|^2 = 0$  e  $|\beta|^2 = 1$ , quando consideramos uma base computacional. Além do mais, os autovalores da matriz  $\rho$  são sempre positivos,  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \dots, \lambda_n \geq 0$ . É importante citar, que os autovalores estão relacionados as probabilidades de medir cada um dos autovetores. Outro ponto importante, é que a matriz densidade será sempre uma matriz quadrada de ordem  $n \times n$ . Então, conforme aumenta o número de sistemas estudados, aumenta-se a ordem da matriz, obedecendo a restrição  $n = n^2, \forall n \in \mathbb{N} \geq 2$ .

Sistemas compostos são constituídos de duas ou mais partes, em que chamamos de subsistemas quânticos. Se consideramos dois sistemas quânticos 1 e 2, o espaço de fase quântico para essas duas partes ou subsistemas é chamado de espaço vetorial de Hilbert  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$ . O espaço de fase para um sistema composto por dois subsistemas 1 e 2 é dado pelo produto tensorial entre  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$ , que pode ser construído como sendo gerado por todos os pares diferentes de vetores das bases de cada um dos espaços, como a seguinte equação:

$$H_{12} = H_1 + H_2 \quad (4)$$

A coerência quântica é uma propriedade intrínseca a matéria. Ela ocorre quando um sistema quântico se encontra em um ou mais estados ao mesmo tempo, ou seja, sobreposição quântica. Esta propriedade, tem um papel fundamental na física, uma vez que está implícita a ocorrência de correlações quânticas, tais como o emaranhamento e discórdia.

Estes fenômenos são muito importantes no contexto da computação e informação quântica. Segundo (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014), para calcularmos a coerência quântica, devemos associar os elementos fora da diagonal principal de uma matriz densidade, dado uma base de referência. A coerência quântica possui várias medidas geométricas, dentre elas, destacamos o quantificador de coerência baseado na norma- $l_1$ . Neste artigo, iremos nos basear nesta medida, que pode ser descrito pela seguinte equação:

$$C_{l_1}(\rho) = \sum_{i \neq j} |\rho_{i,j}| \quad (5)$$

## RESULTADOS E DISCUSSÕES

Tomando como base um sistema quântico composto de dois *qubits* 1 e 2 e os elementos de matriz densidade na base ortonormal  $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ . A saber, o operador densidade descreve o estado quântico do sistema. A matriz densidade desse sistema com os devidos elementos de probabilidade, é representada por:

$$\rho_{12} = \begin{pmatrix} |a|^2 & ab^* & ac^* & ad^* \\ a^*b & |b|^2 & c^*b & d^*b \\ a^*c & b^*c & |c|^2 & d^*c \\ a^*d & b^*d & c^*d & |d|^2 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Da mesma forma, a matriz densidade dada pela equação 6, é expressa por:

$$\begin{aligned} \rho_{12} &= \sum_i \rho_i |u_i\rangle\langle u_i| = \{|0_1\rangle, |1_1\rangle\} \otimes \{|0_2\rangle, |1_2\rangle\} \\ &= (a|00\rangle + b|01\rangle + c|10\rangle + d|11\rangle) * (\langle 00|a^* + \langle 01|b^* + \langle 10|c^* + \langle 11|d^*) \\ &= |a|^2 |00\rangle\langle 00| + ab^* |00\rangle\langle 01| + ac^* |00\rangle\langle 10| + ad^* |00\rangle\langle 11| \\ &+ a^*d |01\rangle\langle 00| + |b|^2 |01\rangle\langle 01| + c^*d |01\rangle\langle 10| + d^*b |01\rangle\langle 11| \\ &+ a^*c |10\rangle\langle 00| + b^*c |10\rangle\langle 01| + |c|^2 |10\rangle\langle 10| + d^*c |10\rangle\langle 11| \\ &+ a^*d |11\rangle\langle 00| + b^*d |11\rangle\langle 01| + c^*d |11\rangle\langle 10| + |d|^2 |11\rangle\langle 11|. \end{aligned} \quad (7)$$

Por meio do operador traço parcial, podemos determinar o estado do *qubit 1*, sendo  $\rho_1$  a partir de um sistema composto  $\rho_{12} \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . Para tal, calculamos o traço parcial do sistema composto da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \text{Tr}_2\{\rho_{12}\} = \langle 0_2 | \rho_{12} | 0_2 \rangle + \langle 1_2 | \rho_{12} | 1_2 \rangle \\ &= |a|^2 |0\rangle\langle 0| + ac^* |0\rangle\langle 1| + a^*c |1\rangle\langle 0| + |c|^2 |1\rangle\langle 1| \\ &+ |b|^2 |0\rangle\langle 0| + d^*b |0\rangle\langle 1| + b^*d |1\rangle\langle 0| + |d|^2 |1\rangle\langle 1|. \end{aligned} \quad (8)$$

O operador densidade reduzido do subsistema 1,  $\rho_1$  é expresso por:

$$\begin{aligned} \rho_1 &= (|a|^2 + |b|^2) |0\rangle\langle 0| + (ac^* + d^*b) |0\rangle\langle 1| \\ &+ (a^*c + b^*d) |1\rangle\langle 0| + (|c|^2 + |d|^2) |1\rangle\langle 1|. \end{aligned} \quad (9)$$

Destacando na forma matricial,  $\rho_1$  é expressado pela seguinte forma:

$$\rho_1 = \begin{bmatrix} (|a|^2 + |b|^2) & (ac^* + d^*b) \\ (a^*c + b^*d) & (|c|^2 + |d|^2) \end{bmatrix}. \quad (10)$$

Semelhantemente ao processo realizado com o *qubit 1*, para determinamos o estado do *qubit 2*, dado por  $\rho_2$ , aplicamos novamente a operação traço parcial. Desde forma:

$$\begin{aligned} \rho_2 &= \text{Tr}_1\{\rho_{12}\} = \langle 0_1 | \rho_{12} | 0_1 \rangle + \langle 1_1 | \rho_{12} | 1_1 \rangle \\ &= |a|^2 |0\rangle\langle 0| + ab^* |0\rangle\langle 1| + a^*b |1\rangle\langle 0| + |b|^2 |1\rangle\langle 1| \\ &+ |c|^2 |0\rangle\langle 0| + d^*c |0\rangle\langle 1| + c^*d |1\rangle\langle 0| + |d|^2 |1\rangle\langle 1|. \end{aligned} \quad (11)$$

O operador densidade reduzido  $\rho_2$ , do *qubit 2* é dado por:

$$\begin{aligned} \rho_2 &= (|a|^2 + |c|^2) |0\rangle\langle 0| + (ab^* + d^*c) |0\rangle\langle 1| \\ &+ (a^*b + c^*d) |1\rangle\langle 0| + (|b|^2 + |d|^2) |1\rangle\langle 1|. \end{aligned} \quad (12)$$

Escrevendo  $\rho_2$  na forma matricial, temos:

$$\rho_2 = \begin{bmatrix} (|a|^2 + |c|^2) & (ab^* + d^*c) \\ (a^*b + c^*d) & (|b|^2 + |d|^2) \end{bmatrix}. \quad (13)$$

A coerência quântica é dada pelos valores fora da diagonal principal da matriz densidade, basta pegarmos os elementos correspondentes e encontrar a equação para a coerência. Como mencionado anteriormente, este método é válido para a métrica de coerência baseado na norma- $l_1$ . Desta forma, com base na Eq. (5), temos:

$$C_{r_1}(\rho_{12}) = 2(|ab^*| + |ac^*| + |ad^*| + |c^*b| + |d^*b| + |d^*c|). \quad (14)$$

Percebe-se, que os elementos  $|c^*b| = |b^*c|$ , então conseguimos simplificar a Eq. (14) de modo que,

$$C_{r_1}(\rho_{12}) \geq 2|ac^* + d^*b| + 2|ab^* + d^*c|. \quad (15)$$

A Eq. (15), representa a coerência total aplicado a um sistema de dois *qubits*, com a coerência de cada subsistema. Assim como é possível encontrar um estado reduzido de cada *qubit* através da aplicação do operador traço parcial na matriz densidade, semelhantemente, pode ser estabelecido a coerência de cada estado. O valor de coerência para o sistema 1 e 2, é dado pela Eq. (16) e (17), respectivamente:

$$C_{r_1}(\rho_1) = |ac^* + d^*b| + |a^*c + b^*d| = 2|ac^* + d^*b|. \quad (16)$$

$$C_{r_1}(\rho_2) = |ab^* + d^*c| + |a^*b + c^*d| = 2|ab^* + d^*c|. \quad (17)$$

## RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste trabalho, buscamos apresentar conceitos introdutórios de mecânica quântica que são de extrema importância nos estudos de computação quântica. Foram apresentados conceitos, como, notação de Dirac, postulados, operador densidade, sistemas compostos e coerência quântica. A partir dessa breve revisão teórica, exploramos as características da coerência quântica aplicado a um sistema de dois *qubit*. Especialmente, buscamos investigar um quantificador de coerência quântica baseada na norma- $l_1$ . Considerando um estado geral para esse sistema de dois *qubit*, descrito por uma matriz densidade de ordem  $4 \times 4$  na base computacional, utilizamos o operador traço parcial para obter o estado de cada subsistema. Nesse caso, atribuímos  $\rho_1$  e  $\rho_2$  para o *qubit 1* e *2*, respectivamente. Dessa forma, com os estados dos *qubits* em mãos, utilizamos um quantificador de coerência quântica baseada na função de Coerência Norma- $l_1$  para extrair a coerência quântica de cada *qubit*. Calculamos a coerência total do sistema referido e mostramos que ela deve ser maior ou igual a soma das coerências quântica dos subsistemas. A maior dificuldade de desenvolver computadores quântica é manter a coerência quântica entre os *qubits*, pois ela é facilmente destruída quando ocorre alguma interferência do meio externos nesses sistemas. Neste estudo, exploramos

brevemente conceitos de mecânica quântica e destacamos a importância que a coerência quântica tem no âmbito da computação quântica.

### REFERÊNCIAS

BAUMGRATZ, T.; CRAMER, M.; PLENIO, M. B. Quantifying Coherence. **Phys. Rev. Lett.**, v. 113, n. 14, p. 140401, 2014.

EISBERG, R.; RESNICK, R. Física quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas. **Elsevier**, p. 928, 1979.

FERRARO, A. et al. Almost all quantum states have nonclassical correlations. **Phys. Rev. A**, v. 81, n. 5, p. 52318, 2010.

HUELGA, S. F.; PLENIO, M. B. Vibrations, quanta and biology. **Contemporary Physics**, v. 54, n. 4, p. 181–207, 2013.

LOPES, A. O. **Uma Breve Introdução à Matemática da Mecânica Quântica**. Rio de Janeiro: Impa, 2017.

NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. **Quantum computation and Quantum information**. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.

YANOFSKY, Noson S.; MANNUCCI, Mirco A.. **Quantum Computing For Computer Scientists**. New York: Cambridge University Press, 2008. 402 p.