

Emaranhamento Quântico e a Complexidade na Estrutura da Matéria

Quantum Entanglement and the Complexity in the Structure of Matter

Marina Sanino,^a  Tatiana Pauletti,^a  Vivian V. França^{a,*} 

^aUniversidade Estadual Paulista, Instituto de Química, Araraquara-SP, CEP 14800-900, Brasil

*E-mail: vivian.franca@unesp.br

Submissão: 16 de Julho de 2025

Aceite: 6 de Dezembro de 2025

Publicado online: 12 de Dezembro de 2025

Quantum entanglement defies classical intuitions and hints at new possibilities for quantum science and technology. In this brief and introductory article, we aim to give a general idea of what entanglement is and why it matters, especially in the context of quantum chemistry. Entanglement, often described as Einstein's "spooky action at a distance," refers to a type of quantum correlation in which the state of one particle is deeply connected to the state of another, even when they are far apart. We briefly touch on concepts such as separability and the Schmidt decomposition, mention some typical measures of entanglement, such as the von Neumann entropy, and provide a basic overview of experimental approaches, including Bell inequalities and entanglement witnesses. Finally, we offer a glimpse into how entanglement appears in studies of quantum phases and molecular systems, suggesting its potential relevance to chemistry.

Keywords: Quantum entanglement; quantum chemistry; entanglement quantification; Bell inequalities.

1. Introdução: A Lógica Estranha da Mecânica Quântica

O emaranhamento quântico é considerado a característica mais distintiva — e não clássica — da Mecânica Quântica. Trata-se de um fenômeno em que dois ou mais sistemas quânticos, como elétrons, spins ou fótons, passam a ter seus estados tão interligados que não é mais possível descrever cada um separadamente. Mesmo que estejam muito distantes um do outro, o estado de uma partícula depende diretamente do estado da outra, como ilustra a Figura 1.

Essa ideia surpreendente surgiu já nos primórdios da Teoria Quântica. Em 1935, Einstein, Podolsky e Rosen (no famoso artigo EPR¹) argumentaram que a mecânica quântica seria incompleta, justamente por permitir esse tipo de conexão "fantasmagórica" entre partículas. Na mesma época, Erwin Schrödinger analisou as implicações do formalismo quântico e cunhou o termo emaranhamento (*entanglement*, em inglês),² ao perceber que, nesses casos, não se pode descrever as partes de um sistema de forma independente — apenas o sistema como um todo. Ele destacou uma consequência profunda: podemos ter o máximo de conhecimento sobre o todo, mas saber muito pouco, ou quase nada, sobre as partes isoladas. "Esse é o tipo de coisa que continua nos assombrando", escreveu.

A origem matemática desse fenômeno está na forma como a mecânica quântica descreve sistemas formados por várias partes — como uma molécula, um átomo ou um conjunto deles. Na física clássica, o estado de um sistema composto é simplesmente a junção dos estados de cada parte individual, como se colocássemos várias "caixinhas" lado a lado, cada uma com suas próprias propriedades. Na mecânica quântica, dizemos que um sistema é separável quando seu estado pode ser descrito exatamente dessa forma: como um produto simples dos estados das partes, sem nenhum tipo de "conexão quântica". Entretanto, essa junção pode ser bem mais complexa. O conjunto de estados possíveis (espaço de Hilbert) do sistema total é construído usando uma estrutura chamada produto tensorial,³ que permite combinações muito mais ricas: as superposições quânticas. Em alguns casos, essas combinações são tão interligadas que não dá para separar o que pertence a cada parte — são os chamados estados emaranhados.

Mas será que esse emaranhamento é apenas um efeito estatístico, fruto da natureza probabilística da teoria? Durante décadas, muitos pesquisadores exploraram essa dúvida por meio das chamadas teorias de variáveis ocultas,^{1,4} constituídas por hipóteses que propõem a existência de propriedades escondidas, ainda desconhecidas, capazes de determinar com precisão o comportamento das partículas, na tentativa de restaurar uma visão determinista da realidade. Foi só em 1964 que John Bell formulou um teste decisivo.⁵ Ele propôs o chamado modelo de variáveis ocultas locais, que buscava explicar os resultados da mecânica quântica de forma mais intuitiva. Esse modelo baseia-se em três suposições consideradas razoáveis:

realismo (as partículas têm propriedades bem definidas), localidade (não há influências instantâneas à distância) e liberdade de escolha (o experimento é livremente escolhido pelo cientista). A partir disso, Bell derivou limites precisos, as famosas desigualdades de Bell,⁶ que qualquer teoria clássica deveria obedecer.

Porém, a própria mecânica quântica prevê que esses limites podem ser violados quando se realizam medições em sistemas emaranhados — e foi exatamente isso que os experimentos mostraram. A partir da década de 1990, essas violações começaram a ser observadas de forma sistemática.⁷ Ganham destaque os trabalhos de Alain Aspect, John Clauser e Anton Zeilinger^{6,8,9} que manipularam fótons emaranhados e confirmaram, na prática, as previsões da teoria quântica. Por essas descobertas, os três foram premiados com o Nobel de Física em 2022.^{10,11}

Hoje, sabemos que o emaranhamento não é apenas um detalhe curioso da teoria: ele está no cerne das diferenças entre o mundo clássico e o quântico. Também sustenta o funcionamento de tecnologias emergentes, como a computação e a criptografia quânticas. Na química, o emaranhamento é essencial para compreender fenômenos como reações complexas, transferência de energia em sistemas moleculares e o comportamento de elétrons fortemente correlacionados em moléculas.^{12,13} Contudo, determinar com precisão se um estado quântico está ou não emaranhado permanece uma tarefa desafiadora — um tema de fronteira tanto na física quanto na química quântica.¹⁴

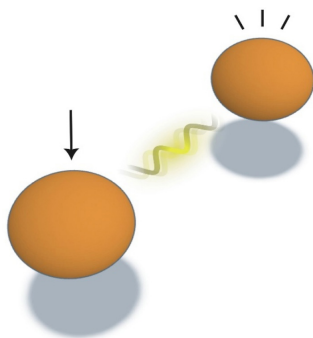


Figura 1. Representação do emaranhamento quântico em que duas partículas compartilham um estado comum. Quando uma delas é medida (indicada pela seta), a outra responde instantaneamente, mesmo estando distante, o que evidencia a conexão não clássica entre elas

2. Emaranhamento: Quando Duas Partículas se Tornam Uma

Para compreender o significado e consequências de estados emaranhados, imagine que temos dois sistemas quânticos em laboratórios diferentes. O primeiro sistema está sob o controle de uma cientista chamada Alice, e pode existir em várias configurações possíveis, contidas em um espaço vetorial matemático chamado espaço de Hilbert, H_A . O tamanho do espaço de Hilbert de Alice, d_A , representa o número de configurações possíveis para o seu sistema A.

E, portanto, se o sistema de Alice estiver no estado $|\psi_A\rangle$, sabemos que esta configuração pertence a H_A , ou seja, $|\psi_A\rangle \in H_A$.

Já o segundo sistema, B, está sob supervisão de um cientista chamado Bob, descrito por um espaço semelhante, H_B , de dimensão d_B , e pode ser preparado em um estado $|\psi_B\rangle$, tal que $|\psi_B\rangle \in H_B$. Se, por exemplo, queremos analisar o sistema conjunto, AB, este sistema combinado será descrito por um novo espaço de Hilbert, que é o produto tensorial dos espaços individuais dos subsistemas:³ $H_{AB} = H_A \otimes H_B$. No caso particular em que o sistema composto AB está em um estado $|\psi_{AB}\rangle$ com uma condição bem definida, e sem misturas, dizemos que o sistema total está em um “estado puro”.^{15,16} Em alguns casos, este estado puro pode ser escrito como um produto dos estados dos subsistemas, ou seja, $|\psi_{AB}\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$, e dizemos que é um estado separável (ou um estado produto). Isso quer dizer que o estado total pode ser decomposto em partes independentes: Alice prepara o estado $|\psi_A\rangle$ no laboratório dela, Bob prepara o estado $|\psi_B\rangle$ no dele, e o sistema total é simplesmente a junção dessas duas partes. Nesse caso, dizemos que A e B não estão emaranhados, pois não há qualquer correlação quântica entre os dois — o que Alice mede não afeta as medidas de Bob, e vice-versa.

Por outro lado, se isso não for possível — isto é, se o estado total não puder ser escrito como um simples produto dos estados dos subsistemas individuais —, então dizemos que o sistema está emaranhado. Isso significa que há correlações genuinamente quânticas entre os dois sistemas, mesmo que estejam distantes um do outro.¹⁷ E caso Alice realize medidas em seu sistema A, isso afetará instantaneamente o estado do sistema B de Bob, e vice-versa. Na prática, ambos os regimes apresentam desafios: preparar um estado separável exige isolar completamente os sistemas, evitando qualquer interação prévia; já criar um estado emaranhado requer induzir interações específicas sem perder a coerência do sistema. Em ambos os casos, é necessário um alto controle experimental.

Para saber se um estado puro é ou não emaranhado, uma técnica muito útil é a decomposição de Schmidt.^{15,18} Esse método garante que qualquer estado puro $|\psi_{AB}\rangle$ de dois sistemas pode ser escrito de forma especial, como:

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{i=1}^M \lambda_i |u_i\rangle_A \otimes |v_i\rangle_B \quad (1)$$

onde, $|u_i\rangle_A$ e $|v_i\rangle_B$ formam bases ortonormais dos sistemas de Alice e Bob, respectivamente. Os coeficientes $\lambda_i \geq 0$ são números reais não negativos que representam o “peso” de cada par de estados $|u_i\rangle_A$, $|v_i\rangle_B$ para o estado total. O quadrado desses coeficientes, λ_i^2 , pode ser interpretado como a contribuição relativa (ou probabilidade associada) de cada termo na soma, e todos eles obedecem à condição de normalização: $\sum_i \lambda_i^2 = 1$. O número de termos M é chamado de posto de Schmidt. Se o posto de Schmidt é 1, o estado é separável, ou seja, há um único coeficiente não-nulo, $\lambda_i = 1$. Se $M > 1$, o estado está emaranhado e há mais de um $\lambda_i \neq 0$. Essa decomposição é muito usada porque fornece

uma maneira matemática clara de diagnosticar a presença de emaranhamento em estados puros.

Para exemplificar, imagine um sistema formado por duas partículas quânticas chamadas qubits (abreviação de quantum bits).^{15,19,20} Um qubit é a menor unidade de informação em um sistema quântico, análogo ao bit clássico, que vale $|0\rangle$ ou $|1\rangle$, mas com uma diferença essencial: o qubit pode estar em uma superposição desses dois estados. Essa propriedade é semelhante à ideia de orbitais híbridos em química, que não são puramente um tipo ou outro, mas uma combinação coerente. Considere então o seguinte estado conjunto de dois qubits:

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |00\rangle + |11\rangle \quad (2)$$

Esse é um dos exemplos mais conhecidos de estado emaranhado, parte do conjunto de estados que chamamos de estados de Bell.²¹ Podemos escrevê-lo na forma de Schmidt, se usarmos:

- $\lambda_1 = \lambda_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$,
- $|u_1\rangle = |0\rangle, |u_2\rangle = |1\rangle$
- $|v_1\rangle = |0\rangle, |v_2\rangle = |1\rangle$

Aqui, o posto de Schmidt é $M = 2$, portanto o estado é emaranhado. Por outro lado, um estado como

$$|\psi_{AB}\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle \quad (3)$$

tem decomposição de Schmidt com posto $M = 1$, ou seja, é separável — não há correlação quântica entre os dois qubits.

Isoladamente, cada coeficiente λ_i revela apenas uma parte da informação e não é capaz de indicar o grau de emaranhamento do sistema. Porém, quando analisados em conjunto, os coeficientes permitem, em muitos casos, quantificar esse fenômeno, como veremos a seguir.

3. O Quanto as Partículas Estão Emaranhadas?

Quando pensamos em emaranhamento, é comum imaginar uma situação binária: ou as partículas estão emaranhadas, ou simplesmente não estão. Mas, na realidade, o sistema pode apresentar diferentes níveis de “conexão” entre suas partes, levando, portanto, a diferentes graus de emaranhamento. Para compreender melhor isto, podemos traçar um paralelo com os laços entre pessoas em uma rede social. Nem todo relacionamento é igualmente forte (embora todos sejam complexos!): alguns amigos são mais próximos e interagem muito, mesmo à distância, quase telepaticamente; enquanto outros mantêm um vínculo mais fraco. Da mesma forma, partículas ou regiões de um sistema quântico podem estar emaranhadas em graus variados — desde uma conexão quase imperceptível até um emaranhamento intenso, que estabelece uma forte correlação entre seus estados quânticos. Por isso, além

de identificar se há ou não emaranhamento em um dado sistema quântico, é fundamental compreender quais partes estão correlacionadas quanticamente entre si e em que grau estão emaranhadas, uma vez que essas correlações definem as propriedades emergentes do sistema e seu potencial tecnológico.

Existem várias maneiras de medir o grau de emaranhamento entre as partes de um dado sistema.^{16,22,23} A forma mais comum (e mais simples!) de estudar o emaranhamento quântico é por meio do emaranhamento “bipartido”, como ilustra a Figura 2. Nesse contexto, bipartido não se refere a um sistema específico, mas sim a uma divisão de um sistema quântico em duas partes, A e B . Essa divisão é feita dentro do espaço de estados possíveis do sistema total (o espaço de Hilbert), e pode ser feita de várias formas, dependendo dos *graus de liberdade* que se deseja investigar e do objetivo da análise.

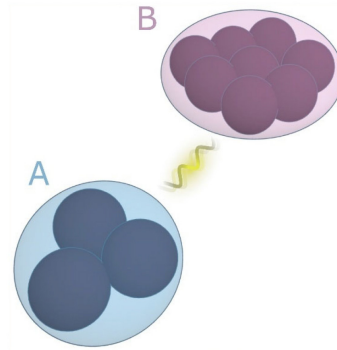


Figura 2. Esquema ilustrativo do emaranhamento entre duas regiões, A e B , de um sistema quântico. A bipartição do sistema total em dois subconjuntos é arbitrária, podendo ser escolhida conforme a conveniência da análise. Essa divisão define uma separação do espaço de Hilbert em dois blocos, permitindo isolar os graus de liberdade relevantes e quantificar o emaranhamento quântico por meio da entropia de emaranhamento

Por exemplo, podemos separar duas partículas distintas, e assim estudar a correlação quântica entre elas, ou dividir entre os diferentes graus de liberdade (como spin e posição) de uma única partícula, algo especialmente relevante em sistemas onde o emaranhamento interno é o recurso explorado, como em alguns protocolos de computação quântica.²⁴ Também é possível realizar a bipartição entre regiões espaciais distintas de um material (ou no espaço de momento), bipartição desse tipo são particularmente valiosas para investigar fenômenos coletivos, como a supercondutividade²⁵⁻²⁷ ou transições de fase quânticas,²⁸⁻³¹ nos quais as correlações quânticas se manifestam de forma mais evidente.

O estado quântico completo de um sistema composto por duas partes, A e B , é descrito por uma matriz densidade conjunta, denotada por ρ_{AB} . Quando queremos estudar especificamente a parte A , sem acessar diretamente os graus de liberdade de B , usamos um procedimento chamado traço parcial sobre B , representado por Tr_B . Esse processo nos dá a matriz densidade reduzida de A , denotada por

$$\rho_A = \text{Tr}_B[\rho_{AB}] \quad (4)$$

A matriz ρ_A descreve como o subsistema A se comporta por si só, embora carregue indiretamente os efeitos das correlações com B . O grau de “mistura” de ρ_A — isto é, o quanto ela se afasta de um estado puro — pode indicar a presença de emaranhamento entre A e B , já que estados mais “impuros” tendem a refletir maior correlação quântica. No entanto, para quantificar de forma precisa o grau de emaranhamento, utilizamos uma medida fundamental derivada da matriz reduzida: a entropia de von Neumann, também chamada de entropia de emaranhamento.^{3,32}

Essa entropia avalia de maneira definitiva o quanto as partes A e B estão emaranhadas, e é calculada a partir da matriz densidade reduzida de um dos subsistemas (por exemplo, A), como segue:

$$S(\rho_A) = -\text{Tr}[\rho_A \log_2 \rho_A] \quad (5)$$

$$= -\sum_{i=1}^M \lambda_i^2 \log_2 \lambda_i^2 \quad (6)$$

onde reescrevemos a equação (6) também em termos da decomposição de Schmidt. Naturalmente há uma reciprocidade no emaranhamento entre A e B , ou seja, o grau das correlações quânticas que A possui com B é o mesmo que B possui com A , por isso é possível mostrar que $S(\rho_A) = S(\rho_B)$.

A entropia de von Neumann pode ser entendida como uma extensão quântica da entropia de Gibbs³³ da mecânica estatística, ou da entropia de Shannon³⁴ da teoria da informação clássica. De fato, quando a matriz densidade é representada em sua base diagonal, obtida pela decomposição de Schmidt, a entropia de von Neumann coincide com a entropia de Shannon.

Em termos simples, quanto maior essa entropia, mais interligadas (ou emaranhadas) estão as duas partes do sistema. A entropia de von Neumann é igual a zero apenas quando o estado do subsistema A é puro, ou seja, quando ele pode ser descrito de forma exata por uma função de onda do tipo $\rho_A = |\psi\rangle\langle\psi|$, com um único coeficiente de Schmidt $\lambda = 1$.

O ponto central é o seguinte: mesmo que o estado completo do sistema (ρ_{AB}) seja puro, o estado reduzido de A não é puro se este estiver emaranhado com B . Dizemos então que o subsistema A está em um estado misto, o que significa que A não tem uma definição precisa por si só — está intrinsecamente correlacionado com B . É exatamente essa “mistura” no estado reduzido que indica que existe emaranhamento entre A e B . E quanto maior a mistura, maior o grau de emaranhamento.

Vale destacar que determinar se um estado é ou não separável é um problema matemático difícil, conhecido como o problema da separabilidade. Isso quer dizer que, embora seja relativamente rápido verificar se uma decomposição correta foi encontrada, descobri-la exige, em geral, um esforço computacional que cresce exponencialmente com

o tamanho do sistema — o que torna o problema muito complexo para sistemas grandes.

Percebe-se, portanto, que a definição tradicional de emaranhamento é negativa: um estado é emaranhado se *não* pode ser escrito como um estado separável. Mais recentemente, uma definição positiva foi proposta: estados emaranhados são aqueles que não podem ser explicados apenas por correlações clássicas; ou seja, apresentam um comportamento que nenhum sistema clássico pode imitar.^{16,22,35} Experimentalmente, contudo, para detectar e quantificar emaranhamento, é necessário relacioná-lo a grandezas observáveis no laboratório, como veremos a seguir.

4. Como Ver o Invisível?

Embora a entropia de von Neumann seja uma medida amplamente usada para quantificar o emaranhamento, ela só se aplica diretamente a sistemas bipartidos e com estado total puro. Em contextos experimentais e em sistemas mais complexos, essa limitação motiva o uso de ferramentas mais versáteis, como as chamadas testemunhas de emaranhamento.^{22,36,37} Essas testemunhas não apenas indicam se um estado está emaranhado, mas também podem fornecer estimativas do grau de emaranhamento. Sua principal vantagem é a praticidade: muitas delas podem ser associadas a observáveis físicos acessíveis em laboratório — como a susceptibilidade magnética²¹ ou as correlações de spin³⁸ — o que as torna especialmente úteis em aplicações químicas e em situações em que não se conhece completamente o estado quântico do sistema.

Do ponto de vista experimental, detectar o emaranhamento é um desafio — mas um que já foi superado em muitos casos, com altíssima precisão. Uma das formas mais diretas de verificar se duas partículas estão emaranhadas é testar as desigualdades de Bell. Essas desigualdades colocam limites no tipo de correlações que podem existir entre duas partículas se elas obedecerem às leis da física clássica (incluindo a ideia de variáveis ocultas locais).

Nos experimentos, a estratégia mais comum é preparar duas partículas (como fótons) em um estado emaranhado e medir suas propriedades, como a polarização, em diferentes orientações. Ao repetir as medições muitas vezes, em diferentes configurações, os pesquisadores constroem uma função de correlação. Se o resultado violar a desigualdade de Bell — especialmente a versão mais usada, chamada desigualdade de CHSH (Clauser-Horne-Shimony-Holt)^{5,21} —, isso indica que as correlações observadas não podem ser explicadas por modelos clássicos, confirmando o emaranhamento.

Esses testes foram realizados de forma pioneira por Alain Aspect, nos anos 1980,⁶ e desde então foram refinados com tecnologias mais precisas.³⁹ Hoje, já se mediram essas violações com elevado controle, eliminando praticamente todas as brechas experimentais. Para químicos, vale destacar

que essas medições se baseiam em correlações de dois pontos, uma ferramenta já familiar em espectroscopia e teoria do acoplamento eletrônico.⁴⁰

Apesar de sua elegância conceitual, as desigualdades de Bell têm limitações. Elas são eficazes para sistemas pequenos (como pares de partículas), mas pouco práticas para sistemas com muitos corpos, como moléculas grandes ou materiais condensados, onde o número de medições exigido cresce rapidamente e os efeitos de ruído se tornam mais relevantes.

Diante disso, as testemunhas de emaranhamento ganharam destaque.^{37,41} Essas ferramentas permitem identificar o emaranhamento com base em medições acessíveis em laboratório, muitas vezes relacionadas a grandezas físicas que já são medidas rotineiramente em química e física da matéria condensada. Elas funcionam como critérios: se certa desigualdade associada a uma testemunha for violada, o estado do sistema é, seguramente, emaranhado.

Assim, a detecção experimental do emaranhamento quântico — seja por desigualdades de Bell, seja por testemunhas — conecta profundamente a teoria à prática. E, para os químicos, oferece uma ponte concreta entre os conceitos quânticos abstratos e as propriedades mensuráveis de sistemas reais.

5. Emaranhamento como Base da Matéria: Onde Nasce a Complexidade

O emaranhamento, por muito tempo visto como um fenômeno misterioso da física fundamental, hoje é reconhecido como algo muito concreto: uma ferramenta poderosa para explorar as propriedades da matéria e, ao mesmo tempo, um recurso real que pode ser aproveitado em aplicações tecnológicas. Ou seja, por meio do emaranhamento, podemos tanto repensar sistemas complexos quanto ter uma nova caixa de ferramentas para explorá-los e transformá-los.

De um lado, o emaranhamento tem se mostrado essencial para entender o comportamento coletivo de sistemas complexos — como sólidos, moléculas com muitos elétrons ou materiais com interações fortes. Ele nos ajuda a responder perguntas que não podem ser explicadas apenas observando partículas isoladas. Um exemplo impressionante são as transições de fase quânticas.

Diferentemente das transições clássicas — como a água fervendo ou o gelo derretendo — que são causadas por mudanças de temperatura, as transições de fase quânticas ocorrem a temperaturas próximas do zero absoluto.^{29,42,43} Nessas situações extremas, as flutuações quânticas (e não o calor) dominam, fazendo com que o sistema mude abruptamente de uma fase para outra — por exemplo, de um isolante para um supercondutor.^{26,28,42} Durante esse processo, o padrão de emaranhamento entre as partículas também muda, revelando correlações profundas que não se

observam em medidas tradicionais, como condutividade ou magnetização.

Para investigar essas mudanças invisíveis, os cientistas usam medidas como a entropia de emaranhamento, que indica o grau de conexão quântica entre diferentes partes do sistema. Essa medida costuma apresentar sinais claros quando ocorre uma transição quântica, como máximos, mínimos e saturação, como ilustra a Figura 3. O emaranhamento também ajuda a identificar novas fases da matéria, como os chamados líquidos de spin⁴⁴ ou materiais topológicos,⁴⁵ que não possuem uma ordem clássica, mas sim uma estrutura interna baseada no emaranhamento.

Mas o emaranhamento não serve apenas para investigar — ele faz parte da própria estrutura da matéria. Em muitos materiais quânticos, como supercondutores ou isolantes topológicos, os elétrons não se comportam como partículas independentes, mas como partes de um estado coletivo emaranhado. É essa conexão invisível que dá origem a propriedades emergentes, como a condução sem resistência ou a presença de partículas com cargas fracionárias.

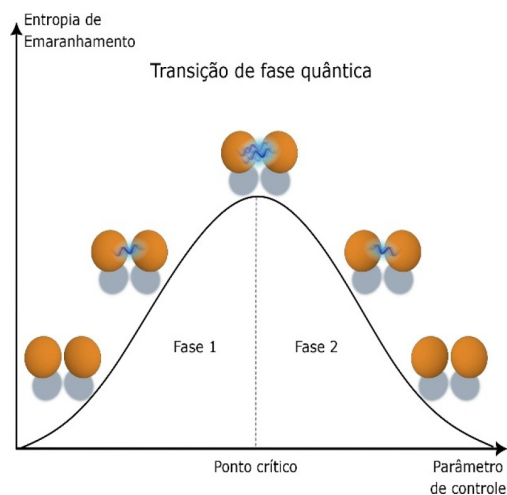


Figura 3. Gráfico ilustrativo mostrando como a entropia de emaranhamento entre duas regiões do sistema varia com um parâmetro que controla a transição de fase. As esferas laranjas representam regiões que podem compartilhar emaranhamento quântico, desde pares de elétrons, até blocos extensos de sistemas fortemente correlacionados e complexos. A figura destaca o papel do emaranhamento como indicador de mudanças no estado global

Na química, o emaranhamento também ocorre em ligações covalentes — especialmente quando elétrons formam pares em estados de singleto. E há evidências de que ele contribui para a eficiência de processos como a transferência de energia em sistemas biológicos ou em materiais fotossensíveis.^{46,47} Métodos computacionais modernos já começam a incorporar medidas de emaranhamento para melhorar a descrição de estados eletrônicos fortemente correlacionados,¹³ como ocorre em complexos metálicos, materiais magnéticos e sólidos moleculares. Além disso, aprender a manipular o emaranhamento quântico abre portas para uma série de aplicações inovadoras que prometem transformar diversas áreas da ciência e

tecnologia.⁴⁸ Por exemplo, sensores moleculares baseados em emaranhamento podem alcançar níveis de sensibilidade muito superiores aos sensores clássicos, permitindo a detecção de pequenas variações no ambiente, como campos magnéticos, temperaturas ou forças, com precisão sem precedentes.⁴⁹ Na área da informação, o emaranhamento é fundamental para o desenvolvimento de dispositivos de armazenamento e processamento de dados quânticos — os chamados computadores quânticos — que podem resolver problemas complexos muito mais rapidamente do que os computadores tradicionais.^{50,51} Além disso, o controle do emaranhamento pode influenciar diretamente a seletividade e a eficiência de reações químicas, possibilitando reações direcionadas ou moduladas por propriedades quânticas, o que abre novas possibilidades para a síntese de moléculas e materiais com propriedades personalizadas.¹⁴

6. Da Correlação ao Emaranhamento: Repensando a Ligação Química

A Química, como ciência da matéria, busca compreender desde sua composição até os mecanismos de interação e transformação em escala atômica e molecular. Nesse contexto, o emaranhamento quântico não é um elemento externo, mas reflete uma propriedade intrínseca das correlações eletrônicas que sustentam as ligações químicas. Quando dois átomos compartilham elétrons, estes deixam de estar associados a um único núcleo e passam a formar um estado quântico coletivo e correlacionado, cuja descrição exige necessariamente correlações não separáveis entre as partículas, isto é, emaranhamento.

Um exemplo paradigmático é a molécula de hidrogênio (H_2): à medida que os átomos se aproximam, seus elétrons interagem e formam um estado singleto emaranhado. Esse estado combina simultaneamente o emaranhamento de spin — no qual os elétrons apresentam spins opostos de forma inseparável — e o emaranhamento espacial, relacionado ao compartilhamento do orbital molecular. Quando os átomos se afastam, o grau de emaranhamento decai, o que reflete diretamente o enfraquecimento da ligação.^{52,53,54}

Essa relação entre emaranhamento e ligação química foi demonstrada quantitativamente em diferentes sistemas moleculares.^{55,56} Nesses estudos, o emaranhamento orbital serve como uma grandeza física associada ao caráter e à força da ligação, oferecendo uma visão mais rica do que a obtida apenas com orbitais de fronteira ou com densidades de carga. Trabalhos pioneiros mostraram ainda que o grau de emaranhamento entre orbitais pode ser usado como medida da correlação eletrônica, conectando a descrição tradicional da química quântica à estrutura fundamental das correlações do sistema.^{57,58}

Mais recentemente, o conceito de emaranhamento foi incorporado ao vocabulário da informação quântica aplicada à química, o que deu origem a uma nova abordagem interpretativa da função de onda molecular.^{56,59} Nessa

perspectiva, medidas de emaranhamento passam a ser tratadas como quantidades físicas derivadas, capazes de revelar aspectos qualitativos dos processos de ligação e reatividade que escapam aos modelos clássicos.

Ressaltamos, contudo, que o papel do emaranhamento vai além da interpretação conceitual: ele já se apresenta como recurso prático em simulações quânticas de sistemas químicos. Em arquiteturas de computadores quânticos e algoritmos variacionais, o controle e a quantificação do emaranhamento são cruciais tanto para otimizar a expressividade dos *ansatz* e o cálculo de energias eletrônicas quanto para interpretar os resultados obtidos.⁶⁰⁻⁶³ Essa convergência entre química quântica e informação quântica não apenas reforça a importância do emaranhamento na descrição da matéria, mas também sugere que a ligação química pode ser reinterpretada como um recurso quântico fundamental.

7. O Que o Emaranhamento ainda Pode Revelar?

Apesar de seu enorme potencial, o emaranhamento quântico permanece um desafio. Sua estrutura é altamente complexa, difícil de descrever quando muitos corpos estão envolvidos. Ele também é extremamente sensível ao ambiente — interações externas mínimas já podem degradar essas correlações. Além disso, não podemos aumentar o emaranhamento entre partículas separadas apenas com ações locais, o que limita seu uso em aplicações de longo alcance, como redes quânticas.^{64,65} Mas são justamente essas dificuldades que tornam o estudo do emaranhamento tão estimulante. Ao enfrentá-las, a ciência avança: desenvolvemos novas ferramentas matemáticas, técnicas experimentais sofisticadas e métodos computacionais que abrem caminho para inovações antes inimagináveis.

Para a química, isso representa uma oportunidade única. O emaranhamento oferece uma nova lente para enxergar a matéria — não apenas como um arranjo de átomos e elétrons, mas como sistemas cujas propriedades emergem das conexões quânticas entre suas partes. Essa visão pode transformar nossa forma de entender ligações químicas, reatividade, estados excitados e correlações eletrônicas em moléculas e sólidos.

À medida que aprendemos a detectar, quantificar e até manipular o emaranhamento em sistemas reais, esse fenômeno deixa de ser uma curiosidade da física fundamental para se tornar uma ferramenta prática — tão importante quanto os orbitais ou a hibridização. Usá-lo poderá nos permitir projetar materiais com propriedades inéditas, desenvolver algoritmos quânticos para química computacional ou até entender melhor processos biológicos em escala molecular.

Uma questão simples, porém, inquietante, permanece: se o emaranhamento já está nos ajudando a repensar conceitos

tradicionais, o que mais ele poderá nos mostrar? Talvez, ao explorá-lo com mais profundidade, sejamos conduzidos não apenas a novas aplicações tecnológicas, mas também a um entendimento mais sutil e abrangente da própria natureza da matéria.

Agradecimentos

MS é apoiada pela Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), processos 2023/02293-7 e 2025/07040-5. TP recebe apoio do CNPq, processo 140854/2021-5. VVF é apoiada pela FAPESP, processos 2021/06744-8, 2025/02935-4 e 2025/13615-0, e pelo CNPq, processos 403890/2021-7 e 306301/2022-9.

Contribuições dos Autores

Todos os autores contribuíram igualmente para a concepção, desenvolvimento e redação deste trabalho.

Referências Bibliográficas

1. Einstein, A.; Podolsky, B.; Rosen, N.; Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete? *Physical Review* **1935**, *47*, 777. [Crossref]
2. Schrödinger, E.; Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik. *Die Naturwissenschaften* **1935**, *23*, 807. [Crossref]
3. von Neumann, J.; *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics: New Edition*; Wheeler, N. A., Ed.; Princeton University Press: Princeton, 2018. [Crossref]
4. De Broglie, L.; Recherches sur la théorie des Quanta. *Annales de Physique* **1925**, *10*, 22. [Link]
5. Bell, J. S.; On the Einstein Podolsky Rosen Paradox; *Physics Physique* **1964**, *1*, 195. [Crossref]
6. Aspect, A.; Dalibard, J.; Roger, G.; Experimental Test of Bell's Inequalities Using Time-Varying Analyzers. *Physical Review Letters* **1982**, *49*, 1804. [Crossref]
7. Weihs, G.; Jennewein, T.; Simon, C.; Weinfurter, H.; Zeilinger, A.; Violation of Bell's Inequality under Strict Einstein Locality Conditions. *Physical Review Letters* **1998**, *81*, 5039. [Crossref]
8. Freedman, S. J.; Clauser, J. F.; Experimental Test of Local Hidden-Variable Theories. *Physical Review Letters* **1972**, *28*, 938. [Crossref]
9. Scheidl, T.; Ursin, R.; Kofler, J.; Ramelow, S.; Ma, X.-S.; Herbst, T.; Ratschbacher, L.; Fedrizzi, A.; Langford, N. K.; Jennewein, T.; Zeilinger, A.; Violation of Local Realism with Freedom of Choice. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **2010**, *107*, 19709. [Crossref]
10. Nobel Prize Lecture; Nobel Prize lecture: John Clauser, Nobel Prize in Physics 2022. Disponível em: <https://www.youtube.com/watch?v=kv5nMeBozX0&t=1s>. Acesso em: 07 dezembro 2025.
11. Nobel Prize Lecture; Nobel Prize lecture: Anton Zeilinger, Nobel Prize in Physics 2022. Disponível em: <https://www.youtube.com/watch?v=ct2uWbI2vF8>. Acesso em: 07 dezembro 2025.
12. Wang, H.; Kais, S.; Quantum Entanglement and Electron Correlation in Molecular Systems. *Israel Journal of Chemistry* **2007**, *47*, 59. [Crossref]
13. Boguslawski, K.; Tecmer, P.; Orbital Entanglement in Quantum Chemistry. *International Journal of Quantum Chemistry* **2015**, *115*, 1289. [Crossref]
14. Li, J.; Kais, S.; Entanglement Classifier in Chemical Reactions; *Science Advances* **2019**, *5*, e1602741. [Crossref]
15. Nielsen, M. A.; Knill, E.; Laflamme, R.; Complete Quantum Teleportation Using Nuclear Magnetic Resonance. *Nature* **1998**, *396*, 52. [Crossref]
16. Horodecki, R.; Horodecki, P.; Horodecki, M.; Horodecki, K.; Quantum Entanglement. *Reviews of Modern Physics* **2009**, *81*, 865. [Crossref]
17. Genovese, M.; Gramegna, M.; Quantum Correlations and Quantum Non-Locality: A Review and a Few New Ideas. *Applied Sciences* **2019**, *9*, 5406. [Crossref]
18. Eisert, J.; Briegel, H. J.; Schmidt Measure as a Tool for Quantifying Multiparticle Entanglement. *Physical Review A* **2001**, *64*, 022306. [Crossref]
19. Feynman, R. P.; Simulating Physics with Computers. *International Journal of Theoretical Physics* **1982**, *21*, 467. [Crossref]
20. Preskill, J.; *Lecture Notes for Physics 229: Quantum Information and Computation*. California Institute of Technology: California, 1998. [Link]
21. Machado, R. R.; Aguiar, C. E.; Demonstrações Simples de Desigualdades de Bell. *Revista Brasileira de Ensino de Física* **2023**, *45*, e20220324. [Crossref]
22. Gühne, O.; Tóth, G.; Entanglement Detection. *Physics Reports* **2009**, *474*, 1. [Crossref]
23. Plenio, M. B.; Virmani, S. S.; An Introduction to Entanglement Theory. Em *Quantum Information and Coherence*; Springer: Cham, 2014, cap. 8, 173. [Crossref]
24. Clauser, J. F.; Horne, M. A.; Shimony, A.; Holt, R. A.; Proposed Experiment to Test Local Hidden-Variable Theories. *Physical Review Letters* **1969**, *23*, 880. [Crossref]
25. Canella, G. A.; França, V. V.; Superfluid-Insulator Transition Unambiguously Detected by Entanglement in One-Dimensional Disordered Superfluids. *Scientific Reports* **2019**, *9*, 15313. [Crossref]
26. Canella, G. A.; França, V. V.; Entanglement in Disordered Superfluids: The Impact of Density, Interaction and Harmonic Confinement on the Superconductor-Insulator transition. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **2020**, *545*, 123646. [Crossref]
27. Arisa, D.; França, V. V.; Linear mapping between magnetic susceptibility and entanglement in conventional and exotic one-dimensional superfluids. *Physical Review B* **2020**, *101*, 214522. [Crossref]
28. Canella, G. A.; França, V. V.; Mott-Anderson Metal-Insulator Transitions from Entanglement. *Physical Review B* **2021**, *104*, 134201. [Crossref]

29. Zawadzki, K.; Canella, G. A.; França, V. V.; D'Amico, I.; Work Statistics and Entanglement Across the Fermionic Superfluid-Insulator Transition. *Advanced Quantum Technologies* **2024**, *7*, 2300237. [Crossref]
30. Pauletti, T.; Sanino, M.; Gimenes, L.; Carvalho, I. M.; França, V. V.; Quantum Phase Transitions in One-Dimensional Nanostructures: A Comparison Between DFT and DMRG Methodologies. *Journal of Molecular Modeling* **2024**, *30*, 268. [Crossref]
31. Arisa, D.; Santos, R. M. D.; Carvalho, I. M.; França, V. V.; Controlling quantum phases with step-like electric potentials in one-dimensional Hubbard systems. *The European Physical Journal B* **2025**, *98*, 238. [Crossref]
32. Pauletti, T.; Silva, M.; Canella, G.; França, V. V.; Linear Entropy Fails to Predict Entanglement Behavior in Low-Density Fermionic Systems. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **2024**, *644*, 129824. [Crossref]
33. Gibbs, J. W.; *Elementary Principles in Statistical Mechanics: Developed with Especial Reference to the Rational Foundation of Thermodynamics*. Cambridge University Press: Cambridge, 2010. [Crossref]
34. Shannon, C. E.; A Mathematical Theory of Communication. *Bell System Technical Journal* **1948**, *27*, 379. [Crossref]
35. Vedral, V.; The Role of Relative Entropy in Quantum Information Theory. *Reviews of Modern Physics* **2002**, *74*, 197. [Crossref]
36. Amico, L.; Fazio, R.; Osterloh, A.; Vedral, V.; Entanglement in Many-Body Systems. *Reviews of Modern Physics* **2008**, *80*, 517. [Crossref]
37. Laurell, P.; Scheie, A.; Dagotto, E.; Tennant, D. A.; Witnessing Entanglement and Quantum Correlations in Condensed Matter: A Review. *Advanced Quantum Technologies* **2025**, *8*, 2400196. [Crossref]
38. Scheie, A.; Laurell, P.; Samarakoon, A. M.; Lake, B.; Nagler, S. E.; Granroth, G. E.; Okamoto, S.; Alvarez, G.; Tennant, D. A.; Witnessing Entanglement in Quantum Magnets using Neutron Scattering. *Physical Review B* **2021**, *103*, 224434. [Crossref]
39. Vieira, C.; Ramanathan, R.; Cabello, A.; Test of the Physical Significance of Bell Non-Locality. *Nature Communications* **2025**, *16*, 4390. [Crossref]
40. May, V.; Kühn, O.; Charge and Energy Transfer Dynamics in Molecular Systems; John Wiley & Sons: 2023.
41. Matsunaga, H.; Ho, L. B.; Detecting and Protecting Entanglement Through Nonlocality, Variational Entanglement Witness, and Nonlocal Measurements. *Physical Review Research* **2025**, *7*, 013239. [Crossref]
42. Canella, G. A.; Zawadzki, K.; França, V. V.; Effects of Temperature and Magnetization on the Mott-Anderson Physics in One-Dimensional Disordered Systems. *Scientific Reports* **2022**, *12*, 8709. [Crossref]
43. Silva, W. C. F.; Medeiros-Silva, A. R.; Mondaini, R.; França, V. V.; Paiva, T.; Single-Site Entanglement as a Marker for Quantum Phase Transitions at Non-Zero Temperatures. *arXiv* **2025**, *1*. [Crossref]
44. Isakov, S. V.; Hastings, M. B.; Melko, R. G.; Topological Entanglement Entropy of a Bose-Hubbard Spin Liquid. *Nature Physics* **2011**, *7*, 772. [Crossref]
45. Sanino, M.; Carvalho, I. M.; França, V. V.; Entanglement as a Topological Marker in Harmonically Confined Attractive Fermi-Hubbard Chains. *APL Quantum* **2025**, *2*, 026129. [Crossref]
46. Boyn, J.-N.; Xie, J.; Anderson, J. S.; Mazziotti, D. A.; Entangled Electrons Drive a Non-Superexchange Mechanism in a Cobalt Quinoid Dimer Complex. *The Journal of Physical Chemistry Letters* **2020**, *11*, 4584. [Crossref]
47. Aslopovsky, V. R.; Scherbinin, A. V.; Bochenkova, A. V.; Enhancing Two-Photon Absorption of Green Fluorescent Protein by Quantum Entanglement. *The Journal of Physical Chemistry B* **2024**, *129*, 2168. [Crossref]
48. Rigolin, G.; Emaranhamento Quântico. *Physicae* **2008**, *7*, 1. [Crossref]
49. Porto, C. M.; Fonseca, M. S.; Morais, G. S. T.; Villas-Boas, C. J.; Nome, R. A.; Morgon, N. H.; Computação Quântica em Química. *Química Nova* **2025**, *48*, e20250072. [Crossref]
50. Zhang, Z.; You, C.; Magaña-Loaiza, O. S.; Fickler, R.; León-Montiel, R. J.; Torres, J. P.; Humble, T.; Liu, S.; Xia, Y.; Zhuang, Q.; Entanglement-Based Quantum Information Technology: A Tutorial. *Advances in Optics and Photonics* **2024**, *16*, 60. [Crossref]
51. Bennett, C. H.; Brassard, G.; Crépeau, C.; Jozsa, R.; Peres, A.; Wootters, W. K.; Teleporting an Unknown Quantum State via Dual Classical and Einstein-Podolsky-Rosen Channels. *Physical Review Letters* **1993**, *70*, 1895. [Crossref]
52. Schliemann, J.; Cirac, J. I.; Kuś, M.; Lewenstein, M.; Loss, D.; Quantum correlations in two-fermion systems. *Physical Review A* **2001**, *64*, 022303. [Crossref]
53. Legeza, Ö.; Sólyom, J.; Optimizing the density-matrix renormalization group method using quantum information entropy. *Physical Review B* **2003**, *68*, 195116. [Crossref]
54. Boguslawski, P.; Reiher, M.; Legeza, Ö.; Entanglement measures for chemical bonds. *The Journal of Physical Chemistry Letters* **2012**, *3*, 3129. [Crossref]
55. Schuch, N.; Verstraete, F.; Cirac, J. I.; Quantum entanglement theory in the presence of superselection rules. *Physical Review A* **2004**, *70*, 042310. [Crossref]
56. Ding, F.; Matito, E.; Schilling, C.; From entanglement to bonds: Chemical bonding concepts from quantum information theory. *arXiv* **2025**, *1*. [Crossref]
57. Huang, Z.; Kais, S.; Entanglement as a measure of electron-electron correlation in quantum chemistry calculations. *Chemical Physics Letters* **2005**, *413*, 1. [Crossref]
58. Njagic, B.; Gordon, M. S.; Exploring the effect of anharmonicity of molecular vibrations on thermodynamic properties. *The Journal of Chemical Physics* **2006**, *125*, 224102. [Crossref]
59. Greene-Diniz, G.; Self, C. N.; Krompiec, M.; Coopmans, L.; Benedetti, M.; Ramo, D. M.; Rosenkranz, M.; Measuring correlation and entanglement between molecular orbitals on a trapped-ion quantum computer. *Scientific Reports* **2025**, *15*, 2155. [Crossref]
60. Kandala, A.; Mezzacapo, A.; Temme, K.; Takita, M.; Brink, M.; Chow, J. M.; Gambetta, J. M.; Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets. *Nature* **2017**, *549*, 242. [Crossref]
61. Cao, Y.; Romero, J.; Olson, J. P.; Degroote, M.; Johnson, P. D.; Kieferová, M.; Kivlichan, I. D.; Menke, T.; Peropadre, B.; Sawaya, N. P. D.; Sim, S.; Veis, L.; Aspuru-Guzik, A.; Quantum

- chemistry in the age of quantum computing. *Chemical Reviews* **2019**, *119*, 10856. [[Crossref](#)]
62. LI, X.; Entanglement-minimized orbitals enable faster quantum simulations. *arXiv* **2025**, *1*. [[Crossref](#)]
63. Scholes, G. D.; Olaya-Castro, A.; Mukamel, S.; Kirrander, A.; Ni, K.-K.; Hedley, G. J.; Frank, N. L.; The quantum information science challenge for chemistry. *The Journal of Physical Chemistry Letters* **2025**, *16*, 1376. [[Crossref](#)]
64. Zhang, Z.-Y.; Sun, Z.; Duan, T.; Ding, Y.-K.; Huang, X.; Liu, J.-M.; Entanglement Generation of Polar Molecules via Deep Reinforcement Learning. *Journal of Chemical Theory and Computation* **2024**, *20*, 1811. [[Crossref](#)]
65. Ma, M.; Li, Y.; Shang, J.; Multipartite Entanglement Measures: A Review. *Fundamental Research* **2025**, *5*, 2489. [[Crossref](#)]