

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Termalização e Correlações Quânticas nos
contextos de Sistemas Quânticos Abertos e
Cadeias de Spins

Thiago Werlang de Oliveira

UFSCar - São Carlos

Janeiro/2013

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Termalização e Correlações Quânticas nos
contextos de Sistemas Quânticos Abertos e
Cadeias de Spins

Thiago Werlang de Oliveira

Tese submetida ao Departamento de Física
da Universidade Federal de São Carlos -
DF/UFSCar, como parte dos requisitos para
obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Celso Jorge Villas-Bôas

UFSCar - São Carlos

Janeiro/2013

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária/UFSCar**

O48tc

Oliveira, Thiago Werlang de.

Termalização e correlações quânticas nos contextos de sistemas quânticos abertos e cadeias de spins/ Thiago Werlang de Oliveira. -- São Carlos : UFSCar, 2013. 205 f.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2013.

1. Física. 2. Transição de fase quântica. 3. Decoerência (Decoherence). 4. Emaranhamento. I. Título.

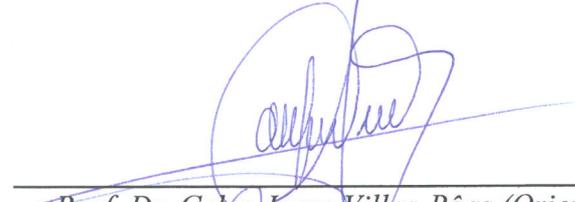
CDD: 530 (20^a)

THIAGO WERLANG DE OLIVEIRA

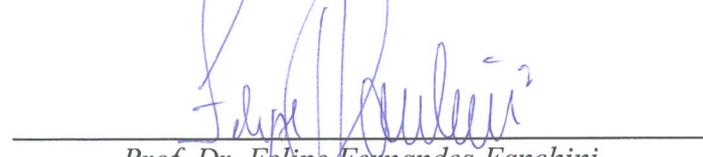
Tese de doutorado submetida à
Coordenação do Programa de Pós-
Graduação em Física, da
Universidade Federal de São
Carlos, como requisito parcial para
a obtenção do título de doutor em
ciências.

Aprovado em: 11 de Janeiro de 2013

BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Celso Jorge Villas-Bôas (Orientador)
Universidade Federal de São Carlos- DF



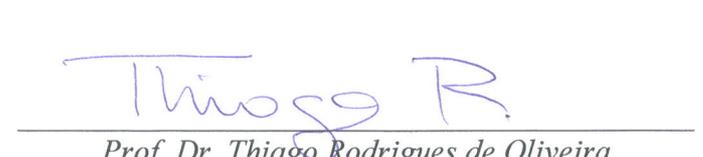
Prof. Dr. Felipe Fernandes Fanchini
Universidade Estadual Paulista - FC



Prof. Dr. Marcel Novaes
Universidade Federal de São Carlos- DF



Prof. Dr. Frederico Borges de Brito
Universidade de São Paulo - IFSC



Prof. Dr. Thiago Rodrigues de Oliveira
Universidade Federal Fluminense - IF

Agradecimentos

Ao professor Celso Jorge Villas-Bôas pela orientação e pelas proveitosas discussões que contribuíram para a minha formação acadêmica. Obrigado pela confiança e por estimular a minha independência científica.

Aos professores Gustavo Garcia Rigolin, Giuliano Augustus Pavan Ribeiro e Felipe Fernandes Fanchini por ajudarem a desenvolver uma parte dos resultados presentes nesta tese.

Aos amigos, colegas e professores que contribuíram para minha formação pessoal e profissional.

Aos meus pais pelo apoio e incentivo ao longo da minha vida.

À Evelyny, pelo amor e paciência em todos os momentos.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

Sumário

1	Introdução	1
2	Correlações Quânticas	5
2.1	Emaranhamento	10
2.1.1	Quantificando o Emaranhamento	12
2.1.1.1	Estado Puros Bipartidos	13
2.1.1.2	Estado Mistos Bipartidos	14
2.2	Discórdia Quântica	16
2.2.1	Elementos da Teoria de Informação Clássica	18
2.2.2	Informação Quântica	20
2.2.2.1	Informação Acessível	23
2.2.3	Quantificando as Correlações Quânticas	25
3	Dinâmica de Correlações Quânticas em Sistemas Quânticos Abertos	31
3.1	Dinâmica Markoviana	32
3.1.1	Defasagem	33
3.1.2	Atenuação de Amplitude Generalizada	36
3.1.3	Despolarização	39
3.1.4	Defasagem e Atenuação de Amplitude	41

3.2	Dinâmica não-Markoviana	44
3.2.1	Reservatórios Independentes	44
3.2.2	Reservatório Coletivo	51
3.3	Considerações Finais	55
4	Transições de Fase Quânticas	57
4.1	Aspectos Básicos das Transições de Fase	57
4.2	Cadeias de Spins	60
4.3	Transições de Fase Quânticas	64
5	Transições de Fase Quânticas e Correlações Quânticas a Tempe- ratura Finita	71
5.1	Introdução	71
5.1.1	Discórdia Quântica num Sistema Térmico	76
5.2	Dois Spins Interagentes: Modelo XYZ	78
5.3	Modelo XXZ	83
5.4	Modelo XY	96
5.5	Considerações Finais	105
6	Termalização em Sistemas de Spins Interagentes	106
6.1	Termalização de Sistemas Abertos	111
6.1.1	Modelo de Ising	117
6.1.1.1	Caso $N = 2$ com N_R arbitrário	118
6.1.1.2	Reservatórios Térmicos Independentes: $N = N_R =$ 2	119
6.1.1.3	Reservatório Térmico Comum: $N = 2$ e $N_R = 1$.	129
6.1.1.4	Caso $N > 2$ com N_R arbitrário	136

6.1.2	Equação Mestra para Hamiltonianos com <i>gaps</i> não-degenerados	137
6.1.3	Modelo XXZ	141
6.1.3.1	Reservatórios Independentes: $N_R = 2$	143
6.1.3.2	Reservatório Comum: $N_R = 1$	152
6.1.4	Uma Rota para o <i>Ensemble</i> de Gibbs	158
6.2	Considerações Finais	164
7	Conclusões	166
A	Medidas em Mecânica Quântica	169
B	Equação Mestra	172
B.1	Função de Correlação	178
B.2	Equação Mestra Markoviana	180
B.3	Estado Estacionário	181
B.4	Reservatório Térmico Bosônico	183
B.5	Reservatórios Térmicos Independentes	186
B.6	Representação Matricial da Equação Mestra	188
B.7	Representação de Kraus	190
	Referências Bibliográficas	194

Resumo

Nesta tese estudamos o comportamento da Discórdia Quântica nos contextos de sistemas quânticos abertos e cadeias de spins. Além disso, investigamos também o processo de termalização de uma cadeia de spins sujeita a interação com o meio-ambiente. Primeiramente, apresentamos uma revisão do conceito de correlação quântica, partindo das ideias iniciais sobre não-localidade e tendo como ponto final a medida de correlações quânticas denominada Discórdia Quântica. Posteriormente, estudamos a dinâmica das correlações quânticas entre dois qubits não-interagentes acoplados a reservatórios térmicos markovianos e não-markovianos. No contexto de cadeias de spins, investigamos o comportamento das correlações quânticas a temperaturas finitas, começando com um sistema formado por dois spins interagentes, descrito pelo modelo XYZ para, em seguida, generalizar este estudo para o caso de cadeias de spins unidimensionais infinitas, descritas pelos modelos XY e XXZ. Neste contexto, investigamos a relação entre as correlações quânticas e as transições de fase quânticas presentes nestes dois modelos. Finalizamos esta tese com um estudo sobre o processo de termalização de dois spins interagentes fracamente acoplados a reservatórios térmicos bosônicos independentes ou um único reservatório coletivo, além de apresentar alguns resultados referentes a sistemas maiores, formados por um número arbitrário de spins.

Palavras-chave: Correlações Quânticas, Sistemas Quânticos Abertos, Transição de Fase Quântica, Termalização

Abstract

In this thesis, we study the behavior of Quantum Discord in the contexts of open quantum systems and spin chains. Furthermore, we investigate the thermalization process of a spin chain due to interaction with the environment. First, we present a review on the concept of quantum correlation, beginning with the first ideas on non-locality, and leading to the measure of quantum correlations called Quantum Discord. Afterwards, we study the dynamics of the quantum correlations between two non-interacting qubits coupled to Markovian and non-Markovian thermal reservoirs. In the context of spin chains, we investigate the behavior of quantum correlations at finite temperatures, starting with a system composed of two interacting spins, described by XYZ model, in order to generalize this study to the case of infinite unidimensional spin chains, described by XY and XXZ models. In this context, we investigate the relationship between quantum correlations and quantum phase transitions present in these two models. We conclude this thesis with a study of the thermalization process of two interacting spins weakly coupled to independent bosonic thermal reservoirs, or to a single collective reservoir, besides presenting some results for larger systems, composed of an arbitrary number of spins.

Keywords: Quantum Correlations, Open Quantum Systems, Quantum Phase Transitions, Thermalization

Lista de Figuras

2.1	Esquema da montagem experimental para as desigualdades de Bell. O observador A pode escolher uma determinada configuração do seu aparato de medida, identificada por \mathbf{a} , enquanto que o observador B também escolhe a configuração \mathbf{b} do seu aparato. Ainda, A e B estão separados por uma distância tal que o resultado de uma medida em $A(B)$ não interfere no resultado da medida em $B(A)$	8
3.1	Dinâmica das correlações quânticas entre dois qubits não-interagentes sujeitos a ação de reservatórios de fase independentes. (a) Concorrência C e (b) Discórdia Quântica D em função do parâmetro α e do tempo parametrizado p . O estado inicial adotado foi o estado de Werner $\rho(0) = (1 - \alpha)\mathbf{1}/4 + \alpha \psi^-\rangle \langle \psi^- $, com $\alpha \in [0, 1]$ e $ \psi^-\rangle = (01\rangle - 10\rangle)/\sqrt{2}$	36
3.2	Dinâmica das correlações quânticas entre dois qubits não-interagentes sujeitos a ação da atenuação de amplitude generalizada. Concorrência C em função de α e p para (a) $q = 1$ e (c) $q = 2/3$. Discórdia Quântica D em função de α e p para (b) $q = 1$ e (d) $q = 2/3$. Utilizou-se o estado inicial $\rho(0) = \phi\rangle \langle \phi $ com $ \phi\rangle = \sqrt{1 - \alpha} 00\rangle + \sqrt{\alpha} 11\rangle$ onde $\alpha \in [0, 1]$	38

- 3.3 Dinâmica das correlações quânticas entre dois qubits não-interagentes sujeitos a despolarização. (a) Concorrência C e (b) Discórdia Quântica D em função do parâmetro α e do tempo parametrizado p . Utilizou-se o estado inicial $\rho(0) = |\phi\rangle\langle\phi|$ com $|\phi\rangle = \sqrt{1-\alpha}|00\rangle + \sqrt{\alpha}|11\rangle$ onde $\alpha \in [0, 1]$ 41
- 3.4 Dinâmica das correlações quânticas entre dois qubits não-interagentes sujeitos a ação conjunta dos reservatórios de fase e da atenuação de amplitude ($q = 1$). (a) Concorrência C e (b) Discórdia Quântica D em função do parâmetro α e do tempo parametrizado p . Utilizou-se o estado inicial $\rho(0) = |\phi\rangle\langle\phi|$ com $|\phi\rangle = \sqrt{1-\alpha}|00\rangle + \sqrt{\alpha}|11\rangle$ onde $\alpha \in [0, 1]$ 43
- 3.5 Dinâmica das correlações quânticas entre dois qubits não-interagentes acoplados a reservatórios não-markovianos independentes para diferentes estados iniciais [determinados pela eq. (3.63)]: (a) $\alpha = 1/\sqrt{10}$, (b) $\alpha = 1/\sqrt{3}$ e (c) $\alpha = 1/\sqrt{2}$. A Discórdia Quântica é caracterizada pela linha sólida/azul e o Emaranhamento de Formação pela linha tracejada/vermelha. Para gerar estes resultados adotamos $\lambda = 0.01\gamma_0$. O gráfico inserido no painel (a) representa um *zoom* em torno do ponto $t_1 \approx 23.27$ 50
- 3.6 Sistema de três níveis na configuração escada. As transições $|+\rangle \longleftrightarrow |0\rangle$ e $|+\rangle \longleftrightarrow |2\rangle$ possuem a mesma frequência de transição ω_0 . . . 52
- 3.7 Dinâmica das correlações quânticas (CQ) entre dois qubits não-interagentes acoplados ao mesmo reservatório térmico (com $T = 0K$) em função do tempo t , para $\lambda = 0.1\gamma_0$ e para: (a) $\alpha = 0$, (b) $\alpha = 1/\sqrt{10}$, (c) $\alpha = 1/\sqrt{5}$ e (d) $\alpha = 1/\sqrt{2}$. A Discórdia Quântica é caracterizada pela linha sólida/azul e o Emaranhamento de Formação pela linha tracejada/vermelha. 53

3.8 Dinâmica das correlações quânticas (CQ) entre dois qubits não-interagentes acoplados ao mesmo reservatório térmico (com $T = 0K$) em função do tempo t , para (a) $\lambda = 0.1\gamma_0$, (b) $\lambda = \gamma_0$ e (c) $\lambda = 10\gamma_0$. O estado inicial utilizado é dado pela equação (3.63) com $\alpha = 1/\sqrt{3}$. A Discórdia Quântica é caracterizada pela linha sólida/preta e o Emaranhamento de Formação pela linha tracejada/vermelha. 55

4.1 (i) Diagrama de fase no caso onde a fase ordenada se mantém a temperatura finita. A fronteira entre as fases ordenada e desordenada é representada pela linha sólida que termina no ponto crítico quântico B_c . A região hachurada em torno da linha sólida indica onde o comportamento crítico pode ser explicado classicamente. A fase ordenada encontra-se abaixo da linha sólida ($B < B_c$). A fase desordenada é dividida em três regiões, sendo a região entre as linhas tracejadas chamada de região crítica quântica onde as flutuações térmicas e quânticas exercem um papel importante. Para $B > B_c$ e baixas temperaturas a ordem é destruída pelas flutuações quânticas enquanto que na região chamada “thermally disordered” as flutuações térmicas são responsáveis por destruir a ordem. (ii) Diagrama de fase onde a fase ordenada existe apenas para $T = 0$. (Essa figura foi retirada da Ref. [91] 66

5.1 (Retirada da Ref. [108]) Discórdia Quântica (a) e Negatividade (b) entre segundos vizinhos em função do parâmetro g para distintos valores de N 76

5.2 TQD em função da temperatura absoluta kT para o modelo XXZ com $B = 0$ e diferentes constantes de acoplamento. No painel (a) tem-se: $J_z = -0.5$ e $J = 0.1$ (linha sólida), 0.2 (linha tracejada), 0.3 (linha pontilhada), 0.4 (linha traço-pontilhada). No painel (b) tem-se: $J = 0.4$ e $J_z = -0.8$ (linha sólida), -0.7 (linha tracejada), -0.6 (linha pontilhada), -0.5 (linha traço-pontilhada). 79

5.3 (a) TQD e (b) EoF em função da constante de acoplamento J para o modelo XXX ($J_x = J_y = J_z = J$) na ausência de campo externo ($B = 0$) para diferentes temperaturas: $kT = 0.05$ (linha sólida), 0.1 (linha tracejada), 0.5 (linha pontilhada), 1.0 (linha traço-pontilhada). 80

5.4 (a) TQD e (b) EoF em função do parâmetro $\Delta = J_x - J_y$ para $J_x + J_y = 2$ e $J_z = 1$. (c) TQD e (d) EoF em função da constante de acoplamento J_z para $J_x + J_y = 1$ e $\Delta = 7$. Utilizou-se diferentes valores de temperatura absoluta: $kT = 1.0$ (linha sólida), 0.6 (linha traço-pontilhada), 0.1 (linha tracejada), 0.01 (linha pontilhada). . . 81

5.5 (a) TQD e (b) EoF em função da temperatura absoluta kT e do campo magnético externo B para o modelo de Ising ($J_x = J$ e $J_y = J_z = 0$) com $J = 1$ 82

5.6 TQD (a e b) e EoF (c e d) em função da temperatura absoluta kT para o modelo XY ($J_x, J_y \neq 0$ e $J_z = 0$) no campo transversal B . Para (a) e (b) usamos $J_x = J_y = 1$ enquanto que para (c) e (d) usamos $J_x = 1.3$ e $J_y = 0.7$. Os valores de B utilizados foram: $B = 1.1$ (linha sólida), 2.0 (linha tracejada), 2.5 (linha pontilhada) 83

5.7 (a) TQD e (b) EoF em função do parâmetro Δ para o modelo XXZ no limite termodinâmico com $h = 0$ e diferentes valores de kT . Os valores de kT utilizados foram: $kT = 0$ (linha preta), 0.1 (linha vermelha), 0.5 (linha azul), 1.0 (linha verde), 2.0 (linha laranja). Estas curvas podem ser organizadas da seguinte forma: de cima para baixo, na região $-1 < \Delta < 1$, $kT = 0, 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$. As linhas verticais tracejadas indicam os pontos críticos $\Delta_{inf} = 1$ e $\Delta_1 = -1$ 88

5.8 (a) Funções de Correlação, (b) Entropia, (c) Calor Específico e (d) Susceptibilidade Magnética em função do parâmetro Δ para o modelo XXZ no limite termodinâmico com $h = 0$ e diferentes temperaturas. Os valores de kT utilizados foram: $kT = 0$ (linha verde), 0.1 (linha preta), 0.5 (linha azul), 1.0 (linha vermelha), 2.5 (linha azul). As curvas das Funções de Correlação referentes a $kT = 0$ e $kT = 0.1$ são indistinguíveis. 89

5.9 TQD (linha solida/preta) e EoF (linha tracejada/vermelha) em função do parâmetro Δ para o modelo XXZ no limite termodinâmico com $h \neq 0$ e $T = 0K$. Os valores de h utilizados foram: (a) $h = 2$, (b) $h = 6$, (c) $h = 12$ 90

5.10 (a) TQD e (b) EoF em função do parâmetro Δ para o modelo XXZ no limite termodinâmico com $h = 6$ e diferentes temperaturas: $kT = 0.02, 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$, ordenadas de cima para baixo tendo como referência $\Delta \approx 2$ 92

5.11 (a) TQD e (b) EoF em função do parâmetro Δ para o modelo XXZ no limite termodinâmico com $h = 12$ e diferentes temperaturas: $kT = 0.02, 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$, ordenadas de cima para baixo tendo como referência $\Delta \approx 3$ 92

5.12 Funções Termodinâmicas para o modelo XXZ no limite termodinâmico com $h = 12$ e $kT = 0.02$ (linha preta), $kT = 0.1$ (linha vermelha), $kT = 0.5$ (linha azul), $kT = 1.0$ (linha verde), e $kT = 2.0$ (linha laranja). A temperatura nas curvas da magnetização e das funções de correlação, $\langle \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \rangle$ e $\langle \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_2^z \rangle$, está ordenada de cima para baixo na região com $\Delta < 1$, enquanto que nas demais curvas o ordenamento ocorre no sentido contrário. 93

5.13 (a) Derivada de primeira-ordem e (b) de segunda-ordem da TQD em função do parâmetro Δ para o modelo XXZ no limite termodinâmico com $h = 12$ e $kT = 0.02$ (linha solida), $kT = 0.1$ (linha tracejada), e $kT = 0.5$ (linha pontilhada). As derivadas calculadas aqui foram normalizadas, ou seja, cada curva foi dividida pelo valor máximo da respectiva derivada. Os máximos das derivadas de primeira-ordem e de segunda-ordem estão muito próximos dos pontos críticos $\Delta_1 = 2$ e $\Delta_2 \approx 4.88$, respectivamente. 94

5.14 A diferença entre o valor correto do ponto crítico Δ_c e o valor estimado Δ_e pela TQD (quadrado), EoF (círculo), $\langle \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \rangle$ (seta para cima), e $\langle \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_2^z \rangle$ (seta para baixo) em função da temperatura absoluta kT para $h = 6$ [(a) e (b)] e $h = 12$ [(c) e (d)]. Em (a) e (c) tem-se os pontos críticos das TFQ's de primeira-ordem, enquanto que em (b) e (d) tem-se os pontos críticos das TFQ's de segunda-ordem. 95

5.15 TQD (painel inferior) e EoF (painel superior) em função da temperatura absoluta kT para $h = 0$ e diferentes valores de Δ . Os *insets* mostram o *regrowth* da TQD e do EoF. 96

5.16 (a)-(c) TQD e (d)-(f) EoF função do parâmetro λ para $kT = 0.01$ (linha preta/sólida), $kT = 0.1$ (linha vermelha/tracejada), e $kT = 0.5$ (linha azul/pontilhada) entre primeiros vizinhos. Os valores de γ estão indicados nos gráficos. 100

5.17 (a)-(c) TQD e (d)-(f) EoF função do parâmetro λ para $kT = 0.01$ (linha preta/sólida), $kT = 0.1$ (linha vermelha/tracejada), e $kT = 0.5$ (linha azul/pontilhada) entre segundos vizinhos. Os valores de γ estão indicados nos gráficos. 101

5.18 Pontos críticos (PC) estimados através da TDQ (quadrados pretos) e do EoF (círculos vermelhos) para (a)-(c) primeiros e (d)-(f) segundos vizinhos em função de kT para $\gamma = 0, 0.5$, e 1.0 . A linha tracejada indica o valor correto do ponto crítico, $\lambda_c = 1$. Utilizou-se os seguintes valores de γ : $0, 0.5$, e 1.0 (indicados nos gráficos). No painel (b), os valores dos pontos críticos estimamos pela TQD e pelo EoF coincidem. Nos painéis (d) e (f) existem apenas dois pontos estimados pelo EoF, pois para valores superiores de kT tem-se $EoF(\rho_{0,2}) = 0$ 102

5.19 TDQ (painéis superiores) e do EoF (painéis inferiores) para (a)-(b) primeiros e (c)-(d) segundos vizinhos em função do parâmetro γ . Adotamos $\lambda = 1.5$. Os valores de kT utilizados (curvas ordenadas de cima para baixo) foram: $0.001, 0.1, 0.5, 1.0$, e 2.0 104

6.1 O sistema S é dividido em subsistemas S_j cuja interação entre eles é mediada pelo parâmetro J . (a) Cada subsistema interage com um reservatório térmico a temperatura T onde os reservatórios são independentes. (b) Todos os subsistemas interagem com o mesmo reservatório. 113

6.2 Tempo de termalização τ em função da temperatura kT para $h_z = 1.0$ e para valores de Δ nos intervalos (a) $\frac{h_z}{2} - 1 < \Delta < 1 - \frac{h_z}{2}$, (b) $1 - \frac{h_z}{2} < \Delta < 1 + \frac{h_z}{2}$ e (c) $\Delta > 1 + \frac{h_z}{2}$. Assumiu-se $h_x = 0$ e dissipação ôhmica $f(\omega_{ij}) = \eta\omega_{ij} = \omega_{ij}$ com $\eta = 1.0$ 151

6.3 **Processo 1:** o sistema S está acoplado com um reservatório a temperatura T_b . **Processo 2:** o sistema S encontra-se inicialmente acoplado a um reservatório com temperatura T_0 . Em seguida, a temperatura do reservatório é reduzida até atingir o valor T_b 160

6.4 Distância entre os operadores densidade $\rho(t)$, com $\tau = 1.3 \times 10^4$, e ρ_T em função do tempo t/τ para $kT_0 = 0.30$ (linha preta/sólida), $kT_0 = 0.28$ (linha vermelha/tracejada), $kT_0 = 0.25$ (linha azul/pontilhada) e $kT_0 = 0.20$ (linha verde/ponto-tracejada). 161

- 6.5 Distância traço T_d entre os operadores densidade $\rho(\tilde{t})$ e ρ_{T_b} em função da temperatura do reservatório kT , com $t = \tilde{t} = 1.3 \times 10^{-4}\tau$, para $\delta T = 0.0049$ (linha preta/sólida), $\delta T = 0.163$ (linha vermelha/tracejada), $\delta T = 0.245$ (linha azul/pontilhada) e $\delta T = 0.490$ (linha verde/ponto-tracejada). Conforme δT diminui o estado do sistema $\rho(\tilde{t})$ torna-se mais próximo do estado térmico ρ_{T_b} com $kT_b = 0.1$ 161
- 6.6 Tempo de termalização τ em função do parâmetro Δ para diferentes temperaturas: $kT = 5.0$ (linha preta/sólida), $kT = 4.0$ (linha vermelha/tracejada), $kT = 3.0$ (linha azul/pontilhada) e $kT = 2.5$ (linha verde/ponto-tracejada). *Inset*: Tempo de termalização τ em função do parâmetro Δ para $kT = 0.5$. Para $\Delta = 10$ tem-se $\tau \approx 3.0 \times 10^{13}$ 163
- 6.7 Razão t_1/t_2 em função do parâmetro Δ . Este gráfico mostra que a diferença $t_1 - t_2 > 0$ aumenta a medida que Δ torna-se maior. . . 163

Lista de Tabelas

5.1	Pontos Críticos associados as TFQ de primeira-ordem (Δ_1) e segunda-ordem (Δ_2) do modelo XXZ no limite termodinâmico para diferentes valores do campo externo h	89
6.1	Os autovalores estão ordenados de baixo para cima, do menor para o maior. Nos extremos dos intervalos o espectro do Hamiltoniano \hat{H}_{xxz} torna-se degenerado.	143
6.2	Coeficientes C_{ij} em função do intervalo de variação de Δ . Estes resultados não são válidos para $\Delta \in \{-1, 0, 1, -\frac{3h}{2} - 1, -\frac{h}{2} - 3\}$ e $\Delta \in \{\frac{3h}{2} + 1, \frac{h}{2} + 3\}$	146
6.3	Coeficientes C_{ij} em função do intervalo de variação de Δ . Estes resultados não são válidos para $\Delta \in \{-1, 0, 1, -\frac{3h}{2} - 1, -\frac{h}{2} - 3\}$ e $\Delta \in \{\frac{3h}{2} + 1, \frac{h}{2} + 3\}$	153
6.4	Autovalores da matriz Λ , denotados por λ_j , em função do intervalo de variação de Δ para $T \gg \omega_{ij}$ com $\Gamma_{ijkl}^\pm = -\gamma_{ij}^- - \gamma_{kl}^- \pm \sqrt{(\gamma_{ij}^-)^2 + (\gamma_{kl}^-)^2 - \gamma_{ij}^- \gamma_{kl}^-}$ e $\gamma_{ij}^- = \gamma(-\omega_{ij})$. Estes resultados não são válidos para $\Delta \in \{-1, 0, 1, -\frac{3h}{2} - 1, -\frac{h}{2} - 3\}$ e $\Delta \in \{\frac{3h}{2} + 1, \frac{h}{2} + 3\}$.155	

Capítulo 1

Introdução

Desde o trabalho seminal de John S. Bell [1], que trouxe para o âmbito da física experimental as ideias de Einstein, Podolsky, e Rosen [2] sobre os aspectos não-locais da Mecânica Quântica, ficou claro que as correlações entre os constituintes de sistemas quânticos compostos poderiam exibir características incompatíveis com uma descrição clássica. Os estados que descrevem tais sistemas pertencem à classe dos estados emaranhados que violam alguma desigualdade de Bell [3]. No entanto, a não-localidade¹ não é necessária para a existência de correlações com características não-clássicas². Como demonstrado por Werner [3], existem estados mistos emaranhados locais.

Um dos objetivos da Teoria de Informação Quântica é construir medidas que possam determinar qual a componente quântica das correlações presentes no estado de um sistema quântico composto. Em 2001, H. Ollivier e W. H. Zurek [4] apresentaram uma medida, denominada *Discórdia Quântica*, utilizada para quantificar as correlações quânticas presentes no estado de um sistema quântico bipartido³. Esta medida é construída através da diferença entre duas versões classicamente equivalentes da informação mútua⁴, mas que apresentam características distintas no domínio da Mecânica Quântica. Definida dessa maneira,

¹Nesta tese, o termo “não-localidade” refere-se a violação de alguma desigualdade de Bell.

²No caso de estados puros a não-localidade é uma condição necessária.

³No entanto, ainda não há um consenso na comunidade científica quanto a capacidade de Discórdia Quântica em quantificar as correlações quânticas [5]

⁴Uma função definida na Teoria de Informação Clássica que permite calcular as correlações entre duas variáveis aleatórias.

a Discórdia Quântica é equivalente a uma medida de emaranhamento no caso de estados puros, mas oferece uma noção mais geral de correlação quântica no contexto de estados mistos, mostrando que mesmo estados mistos separáveis podem apresentar correlações de natureza não-clássica. Além do seu papel conceitual, resultados recentes [6–10] sugerem que as correlações quânticas de estados separáveis seriam as responsáveis pela eficiência de certos algoritmos quânticos baseados na computação quântica com estados mistos [11]. A possibilidade de utilizar estas correlações quânticas como uma fonte de recursos computacionais tem gerado um interesse crescente no estudo da Discórdia Quântica.

Como discutido ao longo das últimas décadas [12], um dos problemas para o desenvolvimento de um computador quântico eficiente é a ocorrência de erros durante o processo computacional devido a interação com o meio-ambiente. Esta interação é particularmente danosa para as correlações quânticas, pois ela tende a destruir as coerências presentes no estado do sistema, responsáveis pela existência destas correlações [13]. Por exemplo, como observado por Yu e Eberly [14], o emaranhamento inicial entre dois qubits não-interagentes pode desaparecer *subitamente*⁵ quando os qubits estão acoplados com o meio-ambiente a sua volta. Este resultado desencadeou uma série de trabalhos sobre a dinâmica do emaranhamento no contexto de sistemas quânticos abertos [15–19]. O papel da Discórdia neste contexto começou a ser investigado a partir de 2009 quando A. Shabani e D. A. Lidar [20] demonstraram que a dinâmica de um sistema aberto é equivalente a um mapa completamente positivo se, e somente se, o estado inicial do sistema-reservatório possui Discórdia Quântica igual a zero. Neste mesmo ano, nós apresentamos o primeiro trabalho contendo um estudo sobre a dinâmica da Discórdia Quântica entre dois qubits não-interagentes acoplados ao meio-ambiente [21].

Além das possíveis aplicações no desenvolvimento de protocolos de computação e comunicação quântica, a Discórdia Quântica também tem despertado o interesse entre aqueles que investigam a interface entre a Teoria de Informação Quântica e o comportamento crítico de sistemas de muitas partículas. No regime de temperatura absoluta igual a zero ($T = 0K$), certos sistemas exibem transições

⁵Este comportamento será discutido em detalhes no Capítulo 2.

de fases, denominadas *transições de fase quântica*, conforme um determinado parâmetro do Hamiltoniano que descreve o sistema é alterado. No ponto em que ocorre a transição de fase, chamado *ponto crítico quântico*, pode ocorrer também o apacimento de correlações de longo alcance entre os constituintes do sistema. Segundo J. Preskill [22], correlações quânticas presentes no estado fundamental do sistema poderiam ser a origem destas correlações de longo alcance. Enquanto a relação entre o emaranhamento e as transições de fase quânticas começou a ser investigada a partir do ano de 2002 por T. J. Osborne e M. A. Nielsen [23; 24] e por A. Osterloh e colaboradores [25], a Discórdia Quântica teve o seu ingresso neste campo de estudo apenas no final de 2008, através de trabalho de R. Dillenschneider [26].

A primeira parte desta tese tem como objetivo investigar o papel das correlações quânticas em dois contextos distintos. Inicialmente nos dedicamos ao estudo da dinâmica das correlações quânticas no contexto de sistemas quânticos abertos. O ponto central nesta etapa do trabalho é analisar o comportamento da Discórdia Quântica nas situações em que o emaranhamento desaparece subitamente. O próximo passo foi realizar um estudo sobre as correlações quânticas no contexto de cadeias de spins quânticas unidimensionais. Esta etapa tinha como objetivo comparar as diferenças entre as correlações quânticas quantificadas através Discórdia Quântica e do Emaranhamento de Formação⁶ no regime de temperaturas finitas. Os Capítulos da tese referentes a esta primeira parte foram organizados da seguinte maneira:

No Capítulo 2 é apresentada uma introdução ao conceito de correlação quântica. Nosso objetivo é mostrar como este conceito evoluiu a partir da noção de não-localidade até a formulação atual que envolve a definição da Discórdia Quântica.

No Capítulo 3 apresentamos alguns resultados pioneiros referentes ao estudo do comportamento dinâmico da Discórdia Quântica entre dois qubits não-interagentes, tanto no regime markoviano quanto não-markoviano. Estes resultados mostram pela primeira vez que a Discórdia Quântica possui uma

⁶Esta medida de emaranhamento é apresentada no Capítulo 2.

maior resistência aos efeitos nocivos do meio-ambiente quando comparada ao emaranhamento.

O Capítulo 4 oferece uma breve introdução a teoria de transições de fase, servindo como base para o Capítulo 5, onde foi desenvolvido um estudo sobre o comportamento das correlações quânticas em sistemas de spins interagentes em equilíbrio térmico com um reservatório a temperatura T . Inicialmente considerou-se um sistema formado por apenas dois spins e, posteriormente, investigou-se o comportamento das correlações quânticas no limite termodinâmico, principalmente nas vizinhanças dos pontos críticos quânticos. Neste cenário, procurou-se analisar como a Discórdia Quântica e o Emaranhamento de Formação são afetados pelo aumento de temperatura e como isso influencia a capacidade⁷ destas medidas em detectar os pontos críticos quânticos.

Para realizar o estudo apresentado no Capítulo 5 foi necessário *supor* que o estado de um sistema em equilíbrio térmico com um reservatório a temperatura T pode ser descrito através do *ensemble* de Gibbs [27]. Recentemente, uma série de trabalhos tem retomado a discussão a respeito das condições que asseguram essa descrição [28–35], um tema que permeia a Mecânica Estatística desde os seus primórdios [36; 37]. Tendo em vista essa recente discussão, o trabalho desenvolvido na segunda parte da tese tem como objetivo investigar o processo de *termalização* no âmbito de sistemas quânticos abertos. Em outras palavras, considera-se um sistema quântico composto acoplado *fracamente* a um ou mais reservatórios térmicos, todos a mesma temperatura T , e procura-se determinar quando o estado estacionário do sistema coincide com o estado previsto pelo *ensemble* de Gibbs. Os resultados referentes a esta parte estão contemplados no Capítulo 6.

⁷Até o trabalho desenvolvido neste Capítulo, o uso de medidas de correlações quântica como detectores de pontos críticos quânticos estava restrito ao caso $T = 0K$.

Capítulo 2

Correlações Quânticas

A Mecânica Quântica oferece uma estrutura matemática e conceitual - introduzida mediante um conjunto de postulados - que serve como base para o desenvolvimento de teorias físicas. Segundo o primeiro postulado [12], a todo sistema físico isolado corresponde um espaço de Hilbert¹ denominado espaço de estados. Além disso, o estado de um sistema físico é descrito completamente por meio de um vetor pertencente ao espaço de estados. É importante ressaltar que a Mecânica Quântica apenas afirma a existência do espaço de estados, mas não fornece uma regra para obter o espaço de estados de um dado sistema físico. O fato do espaço de estados ser um espaço de Hilbert destaca uma importante característica da Mecânica Quântica, a superposição de estados. Se $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ pertencem ao espaço de estados, então a superposição $\alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle$, onde α e β são números complexos satisfazendo $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, pertence ao mesmo espaço de estados. Geralmente essa importante propriedade é denominada *princípio de superposição*. Embora o princípio de superposição também esteja presente na física clássica, por exemplo na teoria clássica do eletromagnetismo, a combinação deste princípio com a natureza tensorial² presente na descrição de sistemas quânticos compostos leva a resultados intrigantes. Uma consequência direta dessa combinação é o

¹Um espaço de Hilbert é um espaço vetorial sobre o corpo dos complexos dotado de um produto interno e uma norma derivada deste, onde toda sequência de Cauchy converge para um elemento do espaço.

²O espaço de Hilbert associado a um sistema quântico formado por N subsistemas é $\mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$, onde \mathcal{H}_i denota o espaço de Hilbert associado ao i -ésimo subsistema [12].

emaranhamento de estados³. Este termo apareceu pela primeira vez em 1935 num trabalho de Erwin Schrödinger [38], onde foram investigadas as consequências do princípio de superposição em um mundo macroscópico descrito pela Mecânica Quântica. O emaranhamento é um tipo de correlação de natureza puramente quântica, cujas consequências levaram A. Einstein, B. Podolsky, e N. Rosen a questionar se a Mecânica Quântica seria uma teoria completa capaz de descrever a Natureza [2].

Para ilustrar este importante conceito considera-se um sistema quântico formado por duas partes, denotadas por A e B . Um estado puro emaranhado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ é aquele que não pode ser escrito como $|\psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ com $|\psi_{A(B)}\rangle \in \mathcal{H}_{A(B)}$ onde $\mathcal{H}_{A(B)}$ é o espaço de Hilbert do sistema $A(B)$. Dito de outra forma, um estado puro é emaranhado quando é impossível associar um vetor de estado a cada parte, embora seja possível associar um operador densidade⁴ a cada parte. Um exemplo de estado puro emaranhado é o estado de singlete:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A |\uparrow\rangle_B), \quad (2.1)$$

que descreve o estado de spin de duas partículas de spin-1/2. Se uma medida do spin na direção z da partícula A ou B for realizada, haverá igual probabilidade ($= 1/2$) de medir o spin para cima ou para baixo. Agora, digamos que seja feita uma medida sobre a partícula A e o resultado foi spin para cima. Logo, segundo o postulado da projeção da Mecânica Quântica [12], o estado do sistema após a medida será $|\uparrow\rangle_A |\downarrow\rangle_B$. Com isso, o resultado de uma medida sobre a partícula B torna-se completamente previsível (spin para baixo). Caso a medida sobre a partícula A forneça um spin para baixo, a partícula B teria o spin para cima. Este resultado mostra a existência de uma correlação perfeita entre as componentes z dos spins das duas partículas⁵.

³Como será explicado no decorrer deste capítulo o emaranhamento é um tipo de correlação quântica, mas não o único.

⁴Um operador ρ é um operador densidade se $\rho^\dagger = \rho$, $\text{Tr}(\rho) = 1$, e $\rho > 0$, ou seja, se os autovalores forem não-negativos. O operador densidade ρ deve ser utilizado, por exemplo, quando a preparação do sistema é incerta. Se um estado $|\psi_i\rangle$ é preparado com probabilidade p_i então a mistura estatística de estados $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ é representada pelo operador densidade $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$. Entretanto, pode ocorrer de duas misturas distintas de estados puros $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ e $\{p'_i, |\phi_i\rangle\}$ levarem a um mesmo operador densidade. Isso ocorre se, e somente se, existe uma transformação unitária U tal que $\sqrt{p'_i} |\phi_i\rangle = \sum_j U_{ij} \sqrt{p_i} |\psi_j\rangle$. Logo, o operador densidade não informa como o sistema foi preparado.

⁵Note que esta discussão foi desenvolvida no contexto de estados puros.

Um resultado semelhante a este foi utilizado por A. Einstein, B. Podolsky, e N. Rosen [2] para questionar a completude da Mecânica Quântica. Neste trabalho os autores fizeram duas suposições: 1) as propriedades de uma partícula não são afetadas por operações locais realizadas em uma segunda partícula a uma grande distância da primeira⁶ e 2) uma propriedade corresponde a um elemento de realidade quando ela pode ser predita com certeza absoluta sem perturbar o sistema. A primeira suposição é conhecida como *localidade* e a segunda como *realismo*. Do ponto de vista clássico ambas suposições são intuitivas. Por exemplo, é razoável supor que a existência de um objeto independa da sua observação, ou seja, que uma medida simplesmente revele as propriedades físicas deste objeto. Segundo EPR [2], toda teoria física completa deve conseguir representar um elemento de realidade. Logo, provando que existem elementos de realidade que não são contemplados pela teoria quântica eles estariam demonstrando a incompletude da teoria. Agora, observando o exemplo acima, nota-se que uma medida feita na partícula A determina o spin da partícula B instantaneamente! Portanto, como um observador atuando sobre A pode prever com absoluta certeza o resultado da medida em B , aquela propriedade física deve corresponder a um elemento de realidade. Mas, antes de fazer qualquer medida o estado do sistema não permite afirmar com absoluta certeza qual o spin da partícula B e, além disso, não há um vetor de estado associado à partícula B . Estes argumentos foram usados por EPR [2] para justificar a incompletude da Mecânica Quântica.

Como consequência desses argumentos fomentou-se a ideia de que para a Mecânica Quântica tornar-se uma teoria completa era preciso incluir novas variáveis. Essa possibilidade gerou uma busca por teorias de variáveis ocultas que cumprissem esse papel. Porém, um dos problemas encontrados era a impossibilidade de investigar essa questão de um ponto de vista experimental, o que acabou restringindo as discussões acerca do realismo e da não-localidade ao campo da filosofia. Este cenário atingiu um novo patamar a partir do trabalho de John Bell de 1964 [1]. Neste famoso trabalho Bell deduziu uma desigualdade, sem fazer uso da Mecânica Quântica, que poderia ser testada experimentalmente

⁶Do ponto de vista da Teoria da Relatividade, a partícula B deve estar fora do cone de luz da partícula A .

e, cuja violação, responderia de forma satisfatória se a Natureza é realista ou local.

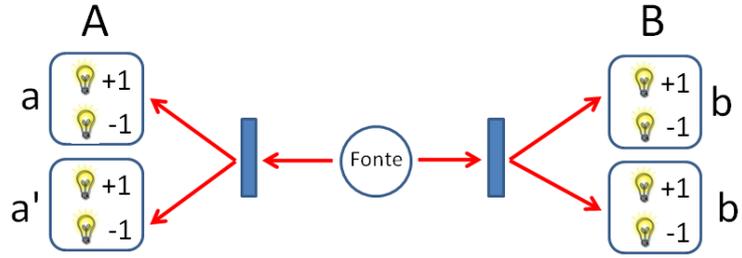


FIGURA 2.1: Esquema da montagem experimental para as desigualdades de Bell. O observador A pode escolher uma determinada configuração do seu aparato de medida, identificada por \mathbf{a} , enquanto que o observador B também escolhe a configuração \mathbf{b} do seu aparato. Ainda, A e B estão separados por uma distância tal que o resultado de uma medida em $A(B)$ não interfere no resultado da medida em $B(A)$.

Para entender os argumentos de Bell⁷ considere o esquema experimental ilustrado na Figura (2.1), onde uma fonte prepara e envia um par de partículas, uma para A e outra para B . Tanto o aparato de medida em A quanto em B podem ser ajustados de acordo com os parâmetros \mathbf{a} e \mathbf{b} , respectivamente. Se as partículas forem fótons, os parâmetros \mathbf{a} e \mathbf{b} representam as orientações dos polarizadores. As medidas de A e B assumem os valores ± 1 . Supondo que as medidas dependam da escolha das orientações (\mathbf{a} e \mathbf{b}) e de um conjunto de parâmetros incontroláveis⁸, representados por λ , pode-se especificar os resultados das medidas da seguinte forma:

$$A(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \lambda) = \pm 1 \quad \text{e} \quad B(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \lambda) = \pm 1, \quad (2.2)$$

onde os possíveis valores de λ são representados pela distribuição de probabilidades $f(\lambda)$, com $\int f(\lambda)d\lambda = 1$, fornecida por uma teoria de variável oculta. Assumindo a hipótese de *localidade*, ou seja, uma medida em A independe da configuração do aparato em B , segue que

$$A(\mathbf{a}, \lambda) = A_a = \pm 1 \quad \text{e} \quad B(\mathbf{b}, \lambda) = B_b = \pm 1. \quad (2.3)$$

⁷A demonstração que será feita é baseada nas Refs. [12; 39] e difere daquela feita originalmente por J. Bell [1].

⁸A impossibilidade de controlar estes parâmetros pode ter origem em alguma dificuldade experimental ou por uma imposição da Natureza.

Vamos supor que as medidas em A (B) sejam realizadas usando duas configurações diferentes, \mathbf{a} e \mathbf{a}' (\mathbf{b} e \mathbf{b}'), escolhidas aleatoriamente. Para calcular as correlações entre A e B faz-se uso da função de correlação definida por:

$$P_{\mathbf{a},\mathbf{b}} \equiv \int A_a B_b f(\lambda) d\lambda. \quad (2.4)$$

Como $A_a, A_{a'} = \pm 1$ segue que $(A_a + A_{a'}) B_b = 0$ ou $(A_{a'} - A_a) B_{b'} = 0$. Para qualquer um dos casos tem-se que

$$A_a B_b + A_{a'} B_b + A_{a'} B_{b'} - A_a B_{b'} = (A_a + A_{a'}) B_b + (A_{a'} - A_a) B_{b'} = \pm 2. \quad (2.5)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} P_{\mathbf{a},\mathbf{b}} + P_{\mathbf{a}',\mathbf{b}} + P_{\mathbf{a}',\mathbf{b}'} - P_{\mathbf{a},\mathbf{b}'} &= \int A_a B_b f(\lambda) d\lambda + \int A_{a'} B_b f(\lambda) d\lambda \\ &+ \int A_{a'} B_{b'} f(\lambda) d\lambda - \int A_a B_{b'} f(\lambda) d\lambda \\ &= \int (A_a B_b + A_{a'} B_b + A_{a'} B_{b'} - A_a B_{b'}) f(\lambda) d\lambda, \end{aligned}$$

e como $A_a B_b + A_{a'} B_b + A_{a'} B_{b'} - A_a B_{b'} \leq 2$, obtém-se a desigualdade de Bell:

$$P_{\mathbf{a},\mathbf{b}} + P_{\mathbf{a}',\mathbf{b}} + P_{\mathbf{a}',\mathbf{b}'} - P_{\mathbf{a},\mathbf{b}'} \leq 2. \quad (2.6)$$

Esta não é a única desigualdade de Bell, na verdade existe um conjunto de desigualdades que recebem o nome de *desigualdades de Bell*, tendo em vista que a primeira foi obtida por J. Bell [1]. O ponto crucial nesta dedução refere-se ao fato de não utilizarmos em nenhum momento a Mecânica Quântica. Os primeiros experimentos visando verificar a violação ou não destas desigualdades ocorreram no início da década de 80, Alan Aspect e colaboradores [40; 41] forneceram fortes indícios experimentais da violação destas desigualdades e, conseqüentemente, do caráter não-local da Natureza. Embora os resultados sejam animadores, não há uma comprovação experimental definitiva da não-localidade, pois ela exige condições experimentais muito ideais. Um teste experimental rigoroso deve satisfazer duas condições: 1) a duração de uma medida deve ser rápida o suficiente para que nenhuma informação viajando a velocidade da luz possa propagar-se entre A e B durante o tempo de medida, e 2) as medidas devem ser muito eficientes de forma tal que seja impossível reproduzir uma violação devido uma pós-seleção apropriada dos resultados medidos.

Na Ref. [42], os autores mostraram que tais imperfeições experimentais podem realmente implicar na violação das desigualdades de Bell. Experimentos envolvendo fótons [41; 43] conseguem suplantar a condição (1), dado que os fótons viajam por longas distâncias e o tempo de detecção é muito curto, mas a eficiência de detecção não é suficiente para assegurar a condição (2). Por outro lado, a condição (2) pode ser alcançada em experimentos com íons aprisionados [44], mas neste caso a distância entre dois íons (representando A e B) não é suficiente para garantir (1). Em 2008, D. N. Matsukevich e colaboradores [45], realizaram um experimento combinando fótons e íons aprisionados. Nesta ocasião, eles conseguiram observar a violação das desigualdades de Bell entre dois íons separados por uma distância de 1 m com uma eficiência de detecção em torno 95%. No entanto, mesmo neste caso não é possível assegurar a validade da condição (1). Ainda segundo D. N. Matsukevich e colaboradores [45], tal condição estaria assegurada para distâncias em torno de 15 km .

2.1 Emaranhamento

Durante muitas décadas após o nascimento da Mecânica Quântica pensou-se que a existência de correlações quânticas estava necessariamente ligada à não-localidade, ou seja, a violação de alguma desigualdade de Bell. Não é difícil compreender esse ponto de vista dado que a violação de uma desigualdade de Bell implica que as correlações não podem ser explicadas por meio de uma teoria de variáveis oculta local. Isso gerou a noção de que um estado que não violasse as desigualdades de Bell seria um estado clássico. Essa situação mudou a partir do trabalho de R.F. Werner [3], que mostrou a existência de estados emaranhados mistos que não violavam as desigualdades de Bell. Portanto, segundo o paradigma de Bell, mesmo com a existência de emaranhamento estes estados seriam exemplos de “estados clássicos”. Esta situação não era satisfatória e buscou-se então uma noção mais adequada de estados clássicos. Um estado clássico passou a ser definido como qualquer estado que pode ser criado com operações locais atuando em cada subsistemas e comunicação clássica entre os subsistemas (LOCC⁹). Uma

⁹Esta sigla refere-se a expressão em inglês “Local Operations and Classical Communication”.

operação local é qualquer operação permitida pela Mecânica Quântica realizada por um observador no seu subsistema. O termo comunicação clássica refere-se a comunicação entre duas partes por meio de dispositivos clássicos como, por exemplo, telefone e *email*. Partindo de estados produto¹⁰, a forma mais geral de um estado misto $\rho_{A_1 \dots A_N} \in \mathcal{H}_{A_1} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{A_N}$, onde A_i ($i = 1, \dots, N$) denota o i -ésimo subsistema de um sistema quântico composto, que pode ser gerado através de operações locais e comunicação clássica é dada pela seguinte expressão:

$$\rho_{A_1 \dots A_N} = \sum_j p_j \rho_j^{A_1} \otimes \dots \otimes \rho_j^{A_N}, \quad (2.7)$$

onde $p_j \geq 0$, $\sum_j p_j = 1$ e $\rho_j^{A_i}$ é o operador densidade referente ao i -ésimo subsistema. Um *estado emaranhado* é então definido como um estado que não pode escrito dessa forma, caso contrário ele é chamado de *estado separável*. Um importante exemplo de estado misto é o estado Werner [3]:

$$\rho_w = \alpha |\psi^-\rangle \langle \psi^-| + \frac{(1-\alpha)}{4} \mathbf{1}, \quad \alpha \in [0, 1] \quad (2.8)$$

onde $|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle - |01\rangle)$ é um estado puro emaranhado e $\mathbf{1}$ é a matriz identidade. Embora este estado seja emaranhado para $\alpha > 1/3$, ele é não-local (viola as desigualdades de Bell) apenas para $\alpha > 1/\sqrt{2}$ [46].

O interesse no estudo do emaranhamento não se restringe apenas aos fundamentos da Mecânica Quântica, mas também como uma alternativa para suplantiar certos limites tecnológicos impostos pela Física Clássica. A partir da década de 90 diversos trabalhos mostraram que o emaranhamento poderia ser tratado como um *recurso* para a execução de diversas tarefas [12]. Por exemplo, duas aplicações diretas do emaranhamento são a *codificação superdensa* [47], onde dois bits de informação clássica podem ser transportados por um único bit quântico (qubit¹¹) e o *teletransporte quântico* [48], um processo que envolve a transferência de um estado entre dois qubits¹². Essa maneira de encarar

¹⁰Estados dado forma $\rho = \rho^{A_1} \otimes \dots \otimes \rho^{A_N}$, onde A_i ($i = 1, \dots, N$) denota o i -ésimo subsistema de um sistema quântico composto.

¹¹Enquanto um bit clássico é descrito pelos estados 0 ou 1, o bit quântico é um estado $|\phi\rangle$ pertencente ao espaço de Hilbert gerado pela base ortonormal $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, ou seja, $|\phi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$ com $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

¹²Este processo não envolve a a transferência de um sistema físico, mas a transferência do estado deste sistema de um lugar a outro.

o emaranhamento gerou a necessidade de determinar quando um estado está emaranhando e, além disso, qual a quantidade de emaranhamento que ele possui.

2.1.1 Quantificando o Emaranhamento

A tarefa de determinar se um dado operador densidade ρ representa um estado quântico emaranhado não é nada trivial. Para sistemas bipartites¹³ existem condições necessárias e suficientes que nos permitem dizer se há emaranhamento. Entretanto, apenas no caso em que o estado do sistema pertence a um espaço de Hilbert de dimensão 2×2 ou 2×3 há um procedimento operacional para verificar se o operador densidade que descreve o sistema é emaranhado. Já no caso de sistemas multipartidos a situação é bem mais complicada. Neste capítulo, o estudo do emaranhamento e das demais correlações quânticas estará sempre restrito a sistemas bipartites discretos.

No caso de estados puros o emaranhamento está intimamente relacionado a questão da não-localidade, ou seja, todo estado puro emaranhado viola alguma desigualdade de Bell [46]. Como afirmado acima isso não é verdade para estados mistos. Por exemplo, o estado de Werner dado pela eq. (2.8) é emaranhado $\alpha > 1/3$, mas ele não viola nenhuma desigualdade de Bell para $\alpha < 1/\sqrt{2}$ [46]. Para valores de α neste intervalo as correlações existentes nesse estado podem ser explicadas através de uma teoria de variável oculta local [3]. Uma condição necessária e suficiente que nos permite dizer se um dado estado (puro ou misto) é emaranhado é o critério de separabilidade de Peres-Horodecki ou critério PPT (*positive partial transpose*) [49; 50]. Entretanto, esse critério fornece uma condição necessária e suficiente para verificar a separabilidade de um estado apenas para sistemas com baixa dimensionalidade (2×2 ou 2×3). Vale mencionar que o critério PPT, como demonstrado por R. Simon [51], também pode ser utilizado na identificação de estados contínuos bipartidos emaranhados, fornecendo um condição necessária. Além disso, no caso de estados gaussianos o critério PPT torna-se uma condição necessária e suficiente de separabilidade. O critério PPT,

¹³Um sistema quântico formado por duas partes como, por exemplo, um sistema de duas partículas.

tendo em vista os sistemas que serão tratados nesta tese, pode ser enunciado da seguinte forma:

Teorema 2.1 *Um estado ρ atuando sobre os espaços $C^2 \otimes C^2$ ou $C^2 \otimes C^3$ é separável se, e somente se, sua transposição parcial¹⁴ é um operador positivo semi-definido¹⁵.*

O fato do critério PPT ser mais eficiente que as desigualdades de Bell na identificação de estados emaranhados pode ser entendida da seguinte maneira: no caso das desigualdades o operador densidade foi utilizado apenas no cálculo de probabilidades, onde apenas as propriedades estatísticas do operador são consideradas. No caso do critério PPT a estrutura matemática do operador densidade como um todo é levada em consideração. Entretanto, até agora é possível dizer apenas quando um estado está emaranhado, mas não a quantidade de emaranhamento do estado. O próximo passo é introduzir medidas que identifiquem e quantifiquem o emaranhamento.

2.1.1.1 Estado Puros Bipartidos

No caso dos estados puros bipartites, Bennett *et al.* [52] mostraram que a entropia de von-Neumann¹⁶ poderia ser utilizada como uma medida de emaranhamento. Como discutido anteriormente, quando um estado global é emaranhado é impossível associar um estado a cada uma das partes. Dito de outra forma, a informação sobre as partes não fornece toda a informação sobre o estado composto. Portanto, se $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ é o operador densidade que representa

¹⁴Considere a matriz densidade ρ dada por:

$$\rho = \sum_{i,j,k,l} p_{ijkl} |i, j\rangle\langle k, l|.$$

Enquanto a operação de transposição troca os índices das linhas pelas colunas, ($\rho_{ijkl} \rightarrow \rho_{klij}$), na operação de transposição parcial apenas dois índices são trocados, ($\rho_{ijkl} \rightarrow \rho_{ilkj}$). Dessa forma, dados dois sistemas, a transposição parcial irá afetar apenas um dos sistemas.

¹⁵Um operador \hat{O} é positivo semi-definido se $\text{Tr}(\hat{O}P) \geq 0$, onde P é um projetor qualquer.

¹⁶Seja ρ um operador densidade puro ou misto. A entropia de von-Neumann associada a ρ é definida como $S(\rho) \equiv -\text{Tr}\rho \log_2 \rho$ [12].

o estado puro $|\psi\rangle$, então a quantidade de emaranhamento de ρ será dada por:

$$E(\psi) = S(\rho_1) = -\text{Tr}\rho_1 \log_2 \rho_1 \quad (2.9)$$

$$= S(\rho_2) = -\text{Tr}\rho_2 \log_2 \rho_2 \quad (2.10)$$

onde $\rho_1 = \text{Tr}_2\rho$ e $\rho_2 = \text{Tr}_1\rho$ são os operadores densidades reduzidos do sistema bipartite. Tal medida recebe o nome de *entropia de emaranhamento*. Se ρ for separável então $\rho = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| \otimes |\psi_2\rangle\langle\psi_2|$. Dessa forma, o traço parcial de ρ com relação a qualquer um dos dois subsistemas resultará em um estado puro, ou seja, $S(\rho_1) = S(\rho_2) = 0$. Isso mostra que para estados separáveis a quantidade de emaranhamento é nula. No caso de estados maximamente emaranhados como, por exemplo, $|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle - |01\rangle)$, a quantidade de emaranhamento é igual a 1. Se d_s é a dimensão do subsistema então $0 \leq E(\psi) \leq \log_2 d_s$. Dessa forma, para estados puros, a entropia de von-Neumann pode ser utilizada para quantificar o emaranhamento para sistemas de qualquer dimensão!

2.1.1.2 Estado Mistos Bipartidos

Para estados mistos a situação se torna mais complicada. Dois pontos que devem ser destacados são: 1) não existe uma única medida de emaranhamento e 2) não há expressões analíticas que nos permitam determinar a quantidade de emaranhamento para um operador densidade qualquer. Além disso, algumas medidas como o Emaranhamento de Formação e a Entropia relativa fazem uso de processos de minimização muito complicados, e mesmo numericamente tais processos não são executados facilmente. Felizmente, os problemas que serão tratados nesta tese envolvem o cálculo do emaranhamento para sistema bipartites de dimensão 2×2 . Neste caso uma boa medida é o *Emaranhamento de Formação* [53]. Além de possuir uma expressão analítica, essa medida será importante na próxima seção, quando estudarmos a Discórdia Quântica.

Um estado misto ρ pode ter distintas decomposições em termos de *ensembles* de estados puros $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$, onde $p_i \geq 0$ com $\sum_i p_i = 1$. A cada decomposição pode-se associar um valor médio de emaranhamento dado pela expressão:

$$\sum_i p_i E(\psi_i), \quad (2.11)$$

onde $E(\psi_i)$ é a entropia de emaranhamento associada ao estado puro $|\psi_i\rangle$. O Emaranhamento de Formação (EoF) é definido como o mínimo com relação a todas as misturas de estados puros $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ que geram o estado ρ [53]:

$$EoF(\rho) = \min_{\{p_i, |\psi_i\rangle\}} \sum_i p_i E(\psi_i). \quad (2.12)$$

Para sistemas com dimensão 2×2 é possível obter uma solução fechada para o processo de minimização da equação (2.12). Esta solução foi obtida em 1997 por Hill e Wootters [54] utilizando uma grandeza também introduzida por eles, a Concorrência $C(\rho)$, definida da seguinte forma:

$$C(\rho) = \max \{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\}, \quad (2.13)$$

onde λ_i é a raiz quadrada dos autovalores de $R = \rho \tilde{\rho}$ em ordem decrescente com $\tilde{\rho} = \sigma^y \otimes \sigma^y \rho^* \sigma^y \otimes \sigma^y$. ρ^* denota o complexo conjugado de ρ . A relação entre o Emaranhamento de Formação e a Concorrência é dada pela expressão:

$$EoF(\rho) = -x \log_2 x - (1-x) \log_2 (1-x), \quad (2.14)$$

com $x = \left(1 + \sqrt{1 - C(\rho)^2}\right) / 2$. Como EoF é uma função monotonicamente crescente de C é comum utilizar diretamente a Concorrência para calcular o emaranhamento de um estado. A Concorrência pode ser simplificada se ρ pertence a classe especial de operadores da forma “X”. A forma matricial destes operadores é dada por:

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & \rho_{14} \\ 0 & \rho_{22} & \rho_{23} & 0 \\ 0 & \rho_{23}^* & \rho_{33} & 0 \\ \rho_{14}^* & 0 & 0 & \rho_{44} \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Neste caso a Concorrência (2.13) é reescrita como:

$$C(\rho) = 2 \max \{0, \Gamma_1, \Gamma_2\}, \quad (2.16)$$

onde $\Gamma_1 = |\rho_{14}| - \sqrt{\rho_{22}\rho_{33}}$ e $\Gamma_2 = |\rho_{23}| - \sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}$.

2.2 Discórdia Quântica

Como discutido acima, as correlações presentes em estados que não violam as desigualdades de Bell podem ser explicadas através de uma teoria local de variáveis ocultas. Além disso, para estados puros a violação destas desigualdades implica que o estado é emaranhado. Já no caso de estados mistos, as desigualdades de Bell não podem ser utilizadas para determinar se um estado é emaranhado, ou seja, mesmo estados cujas correlações são explicadas por meio de uma teoria local de variáveis ocultas podem apresentar um certo grau de emaranhamento. Este resultado é de grande importância, pois mostra que a localidade não inviabiliza a existência de correlações de natureza quântica entre os constituintes de um sistema quântico composto.

Seguindo a linha de raciocínio traçada até o momento, parece razoável fazer o seguinte questionamento: existem correlações quânticas em estados separáveis? Seria a separabilidade a fronteira entre as correlações clássicas e quânticas? Há alguns anos atrás, a resposta usual seria afirmar que não há correlações quânticas em estados separáveis. Atualmente, existe o consenso de que tal afirmação é válida para estados puros. Por outro lado, como observado por H. Ollivier e W. H. Zurek [4] em 2001, e de forma independente por L. Henderson e V. Vedral [55], estados mistos separáveis, que possuem a forma da eq. (2.7), podem apresentar correlações com características não-clássicas. H. Ollivier e W. H. Zurek introduziram uma medida para calcular estas correlações quânticas denominada *Discórdia Quântica*. Embora seja um resultado intrigante, ambos os trabalhos não receberam inicialmente muita atenção da comunidade científica, possivelmente por não existir nenhuma aplicação destes estados no contexto da Teoria de Informação e Computação Quântica.

A situação começou a mudar a partir de 2008, quando, em um trabalho experimental realizado por B. P. Lanyon e colaboradores [6], investigou-se a eficiência do modelo de computação quântica com estados mistos DQC1¹⁷ no

¹⁷Esta sigla se refere à expressão em inglês *Deterministic quantum computation with one pure qubit*. Este modelo de computação quântica foi introduzido por Knill e Laflamme [11] e envolve um conjunto de qubits descritos por um estado misto acoplado a um único estado puro. Embora este modelo não seja universal - não se pode implementar um algoritmo arbitrário - ele permite resolver de forma eficiente algumas tarefas computacionais que são intratáveis classicamente

cálculo do traço de uma matriz unitária. Os resultados obtidos pelos autores mostraram que embora não existisse emaranhamento algum envolvido no decorrer deste processo computacional¹⁸, foi possível observar a existência de correlações quânticas de outra natureza, calculadas através da Discórdia Quântica. Além disso, apenas no caso em que a Discórdia Quântica era não-nula o algoritmo quântico foi mais eficiente que o melhor algoritmo clássico conhecido. A conclusão dos autores foi que as correlações quânticas de estados separáveis seriam responsáveis pela eficiência da abordagem quântica. Embora o emaranhamento desempenhe um papel fundamental em alguns protocolos da computação quântica baseada em estados puros [56], o mesmo não se pode afirmar sobre o seu papel na computação quântica com estados mistos. O função das correlações quânticas no modelo DQC1 foi investigado tanto teoricamente [7; 8; 57] quanto experimentalmente [9; 10], mas como observado na Ref. [5], ainda não há um consenso sobre o papel destas correlações na Teoria de Informação e Computação Quântica.

A introdução da Discórdia Quântica nos permite ir além do paradigma do emaranhamento, estabelecendo uma nova maneira de abordar o conceito de correlação quântica. Antes de introduzir a definição formal da Discórdia vamos apresentar algumas ideias que nos permitiram entender melhor essa nova noção de não-classicalidade. Um estado emaranhado foi definido como aquele que não pode ser preparado via LOCC. Porém, usando LOCC pode-se gerar a partir de bits quânticos dois estados localmente indistinguíveis, por exemplo $|0\rangle$ e $|+\rangle = (1/\sqrt{2})(|1\rangle + |0\rangle)$, enquanto que o mesmo não ocorre quando nos restringimos a manipulação de bits clássicos¹⁹, onde a única operação local possível é o *bit-flip*²⁰[58]. Essa observação levou os autores das Refs. [4; 55; 58] a estender a noção de estado clássico como aquele que pode ser gerado via comunicação clássica e operações locais clássicas sobre bits clássicos. Um estado bipartido ρ_{AB} preparado dessa maneira pode ser escrito da seguinte forma:

$$\rho_{AB} = \sum_{ij} p_{ij} |i\rangle_A \langle i| \otimes |j\rangle_B \langle j|, \quad (2.17)$$

[11].

¹⁸Neste caso, trata-se do emaranhamento entre o estado puro e o estado misto.

¹⁹É importante lembrar que um bit é descrito por um entre dois estados localmente distinguíveis.

²⁰A operação de *bit-flip* transforma os bits 0 e 1 nos bits 1 e 0, respectivamente.

onde $|i\rangle_A$ e $|j\rangle_B$ geram dois conjuntos de estados ortonormais. Os estados descritos pela eq.(2.17) formam um subconjunto dos estados definidos pela eq.(2.7), gerados através da mistura de estados localmente distinguíveis [58]. Intuitivamente, estados não-clássicos são aqueles em que o princípio de superposição se manifesta no âmbito de diferentes espaços de Hilbert (emaranhamento) ou no âmbito de espaços de Hilbert individuais. Entretanto, deve-se ter em mente o seguinte ponto: a não-classicalidade só irá se manifestar quando o princípio de superposição aplicado a cada subsistema gerar um conjunto de estados não-ortogonais. Por exemplo, o operador densidade

$$\rho = \frac{|0\rangle\langle 0| \otimes |-\rangle\langle -| + |1\rangle\langle 1| \otimes |+\rangle\langle +|}{2} \quad (2.18)$$

descreve um sistema bipartite em que ambas as partes são descritas por estados ortogonais. Mesmo que os estados $|+\rangle$ e $|-\rangle = (1/\sqrt{2})(|1\rangle - |0\rangle)$ sejam superposições, ρ é considerado um estado clássico por ter a forma (2.17). Por serem ortogonais, os estados $|+\rangle$ e $|-\rangle$ poderiam ser mapeados nos bits 0 e 1. Estados que possuem a forma da eq.(2.17) possuem Discórdia Quântica igual a zero e portanto não apresentam nenhuma correlação quântica [59]. Para definir a Discórdia Quântica é necessário introduzir alguns conceitos-chave da Teoria de Informação Clássica. A próxima seção atende a essa necessidade.

2.2.1 Elementos da Teoria de Informação Clássica

O principal conceito da Teoria de Informação é a *entropia de Shannon*. Seja X uma variável aleatória que assume o valor x com probabilidade p_x . A entropia de Shannon \mathcal{H} associada à variável aleatória X é definida como:

$$\mathcal{H}(X) = \mathcal{H}(p_x) \equiv - \sum_x p_x \log p_x, \quad (2.19)$$

e pode ser interpretada como a quantidade de incerteza sobre X antes de sua medida [12]. Se X assume valores no conjunto $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ a entropia de Shannon será máxima quando os resultados forem igualmente prováveis, ou seja, quando $p_{x_i} = 1/n$ [12]. Caso um dos resultados x_j ocorra com probabilidade 1, tem-se então que $\mathcal{H}(X) = 0$. Vale lembrar que embora $\log 0$ é indefinido, o termo $0 \log 0 \equiv 0$ devido à existência do limite $\lim_{x \rightarrow 0} x \log x = 0$. Agora,

sejam X e Y duas variáveis aleatórias com distribuições de probabilidade p_x e p_y , respectivamente. A *entropia conjunta* com relação às variáveis X e Y é definida por:

$$\mathcal{H}(X, Y) \equiv - \sum_{x,y} p_{xy} \log p_{xy}, \quad (2.20)$$

onde p_{xy} é a distribuição de probabilidade conjunta²¹. Se X e Y forem variáveis aleatórias *independentes* então $p(x, y) = p_x p_y$. Para variáveis independentes²² $\mathcal{H}(X, Y) = \mathcal{H}(X) + \mathcal{H}(Y)$. Se a independência não existir, ou seja, se existir alguma correlação entre X e Y , então $\mathcal{H}(X, Y) \leq \mathcal{H}(X) + \mathcal{H}(Y)$. Essa propriedade é conhecida como subaditividade da entropia de Shannon [12]. A subaditividade da entropia possibilita a definição de uma medida de correlações entre as variáveis aleatórias X e Y da seguinte forma:

$$\mathcal{I}_c(X : Y) \equiv \mathcal{H}(X) + \mathcal{H}(Y) - \mathcal{H}(X, Y), \quad (2.21)$$

pois $\mathcal{I}_c(X : Y) = 0$ apenas se X e Y forem descorrelacionadas. A função $\mathcal{I}_c(X : Y)$ é conhecida como *Informação Mútua*.

Expressando a probabilidade conjunta p_{xy} em termos da probabilidade condicional [12] $p(x|y) \equiv p_{xy}/p_y$ é possível reescrever a eq.(2.21) como:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_c(X : Y) &= \mathcal{H}(X) + \mathcal{H}(Y) - \mathcal{H}(X, Y) \\ &= - \sum_x p_x \log p_x - \sum_y p_y \log p_y + \sum_{x,y} p_{xy} \log p_{xy} \\ &= - \sum_x p_x \log p_x - \sum_y p_y \log p_y + \sum_{x,y} p(x|y)p_y \log(p(x|y)p_y) \\ &= - \sum_x p_x \log p_x - \sum_y p_y \log p_y + \sum_{x,y} p(x|y)p_y \log p_y \\ &\quad + \sum_{x,y} p(x|y)p_y \log p(x|y), \end{aligned}$$

como $p_y = \sum_x p_{xy} = \sum_x p(x|y)p_y$ temos que $\sum_{x,y} p(x|y)p_y \log p_y = -\mathcal{H}(Y)$, logo

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_c(X : Y) &= - \sum_x p_x \log p_x + \sum_y \sum_x p_y p(x|y) \log p(x|y), \\ &= \mathcal{H}(X) - \sum_y p_y \mathcal{H}(X|Y = y), \end{aligned} \quad (2.22)$$

²¹As distribuições marginais p_x e p_y são obtidas através de $p(x, y)$ da seguinte maneira: $p_x = \sum_y p(x, y)$ e $p_y = \sum_x p(x, y)$.

²²Se X e Y são variáveis aleatórias independentes então $\mathcal{H}(X, Y) = - \sum_{x,y} p_{xy} \log p_{xy} = - \sum_{x,y} p_x p_y (\log p_x + \log p_y) = - \sum_{x,y} p_x p_y \log p_x - \sum_{x,y} p_x p_y \log p_y = \mathcal{H}(X) + \mathcal{H}(Y)$.

onde $\mathcal{H}(X|Y = y) = \sum_x p(x|y) \log p(x|y)$ mede a incerteza de X dado que Y assumiu o valor y . A *entropia condicional* é definida como a média de $\mathcal{H}(X|Y = y)$ com relação a y , ou seja:

$$\mathcal{H}(X|Y) = \sum_y p_y \mathcal{H}(X|Y = y) \quad (2.23)$$

é uma medida da incerteza média sobre X quando Y é conhecida. Com isso, a segunda versão da informação (2.21), escrita em termos de $\mathcal{H}(X|Y)$ e denotada por $\mathcal{J}_c(X : Y)$, é dada por:

$$\mathcal{J}_c(X : Y) = \mathcal{H}(X) - \mathcal{H}(X|Y). \quad (2.24)$$

Embora a entropia condicional não seja necessariamente simétrica, ou seja, pode acontecer de $\mathcal{H}(X|Y) \neq \mathcal{H}(Y|X)$, a informação mútua é sempre simétrica. A eq. (2.24) admite uma segunda interpretação, $\mathcal{J}_c(X : Y)$ fornece a quantidade de informação obtida de X devido o conhecimento de Y . No contexto clássico a igualdade $\mathcal{I}_c(X : Y) = \mathcal{J}_c(X : Y)$ é perfeitamente justificável, mas no caso caso quântico, como será discutido posteriormente, tal igualdade nem sempre é válida.

2.2.2 Informação Quântica

A generalização dos conceitos da Teoria de Informação no contexto da Mecânica Quântica começa com a introdução da versão quântica da entropia de Shannon, conhecida como entropia de von Neumann. Se ρ é um operador densidade então a *entropia de von Neumann* \mathcal{S} associada a ρ é definida como [12]:

$$\mathcal{S}(\rho) \equiv -\text{Tr}(\rho \log \rho) = \sum_i \lambda_i \log \lambda_i, \quad (2.25)$$

onde λ_i denota o i -ésimo autovalor de ρ . A entropia \mathcal{S} quantifica o grau de mistura do estado ρ . Para construir o análogo quântico da informação mútua (2.21) considera-se um sistema quântico bipartido AB descrito pelo operador densidade ρ_{AB} . A *informação mútua quântica* \mathcal{I} é obtida usando a entropia de von Neumann no lugar da entropia de Shannon. Isso leva à seguinte definição:

$$\mathcal{I}(A : B) \equiv \mathcal{S}(A) + \mathcal{S}(B) - \mathcal{S}(A, B), \quad (2.26)$$

onde $\mathcal{S}(A, B) = \mathcal{S}(\rho_{AB})$ é a entropia conjunta. As entropias dos subsistemas A e B são calculadas usando os operadores densidade reduzidos de cada subsistema, respectivamente, $\rho_A = \text{Tr}_B \rho_{AB}$ e $\rho_B = \text{Tr}_A \rho_{AB}$. A eq. (2.26) é sempre positiva pois a entropia de von Neumann é subaditiva [12], ou seja, $\mathcal{S}(A, B) \leq \mathcal{S}(A) + \mathcal{S}(B)$. A igualdade é válida apenas se os estados forem descorrelacionados, $\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B$. Para ilustrar isso considere as decomposições espectrais $\rho_A = \sum_i \lambda_i^A |i\rangle_A \langle i|$ e $\rho_B = \sum_j \lambda_j^B |j\rangle_B \langle j|$, logo $\rho_{AB} = \sum_{ij} \lambda_i^A \lambda_j^B |i\rangle_A \langle i| \otimes |j\rangle_B \langle j|$, onde $\lambda_i^A \lambda_j^B$ são os autovalores de ρ_{AB} . Aplicando a definição de entropia (2.25) e observado que $\sum_i \lambda_i^A = \sum_j \lambda_j^B = 1$:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(\rho_{AB}) &= \mathcal{S}(\rho_A \otimes \rho_B) \\ &= - \sum_{ij} \lambda_i^A \lambda_j^B \log (\lambda_i^A \lambda_j^B) \\ &= - \sum_{ij} \lambda_i^A \lambda_j^B \log \lambda_i^A - \sum_{ij} \lambda_i^A \lambda_j^B \log \lambda_j^B \\ &= \mathcal{S}(A) + \mathcal{S}(B). \end{aligned}$$

Esse resultado mostra que quando a informação mútua $\mathcal{I} = 0$, o estado conjunto ρ_{AB} é descorrelacionado. Não existem correlações de nenhuma natureza, clássica ou quântica.

Por outro lado, o análogo quântico da segunda versão da informação mútua clássica, eq. (2.24), não é obtido tão diretamente. Para ver isso observe que, usando $\mathcal{I}_c(X : Y) = \mathcal{J}_c(X : Y)$, a entropia condicional clássica pode ser escrita como $\mathcal{H}(X|Y) = \mathcal{H}(X, Y) - \mathcal{H}(Y)$. Isso sugere uma definição quântica da entropia condicional simplesmente trocando a entropia de Shannon pela entropia von Neumann, isto é, $\mathcal{S}(A|B) = \mathcal{S}(A, B) - \mathcal{S}(B)$. Mas, supondo que o sistema esteja no estado puro e emaranhado $|\psi\rangle = (|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$, tem-se que $\mathcal{S}(A, B) = 0$ e $\mathcal{S}(B) = 1$. Logo, a entropia condicional $\mathcal{S}(A|B)$ é negativa²³! Isso inviabiliza uma interpretação da entropia condicional quântica que coincida com aquela da Teoria de Informação Clássica. Para construir um análogo quântico da entropia condicional, deve ser ter em mente que diferente do caso clássico, o processo de medida de um sistema quântico pode ser realizado de

²³Para estados puros, a entropia condicional quântica definida dessa maneira atua como uma medida de emaranhamento. Se $|\psi_{AB}\rangle$ for puro então $\mathcal{S}(A|B) < 0$ se, e somente se, o estado $|\psi_{AB}\rangle$ for emaranhado [12].

diferentes maneiras e, além disso, as medidas geralmente perturbam o estado do sistema. No universo quântico o objeto é redefinido pela medida. Uma medida sobre um sistema quântico B é descrita por um POVM²⁴, ou seja, um conjunto formado pelos operadores de medida²⁵ M_b , representado por $\{E_b = M_b^\dagger M_b\}$, com $\sum_b E_b = \mathbf{1}$. Se ρ_{AB} é o estado inicial de um sistema quântico bipartido, então o estado do sistema após a medida ρ_{AB}^M (com resultado desconhecido) é dado por [60]:

$$\rho_{AB}^M = \sum_b M_b \rho_{AB} M_b^\dagger, \quad (2.27)$$

onde o resultado b ocorre com probabilidade $p_b = \text{Tr}(E_b \rho_{AB})$ e o estado do subsistema A é dado pelo operador densidade condicional [60]:

$$\rho_{A|b} = \frac{\text{Tr}_B(E_b \rho_{AB})}{p_b}. \quad (2.28)$$

Com isso, a versão quântica da entropia condicional com relação ao POVM $\{E_b\}$ é definida da seguinte forma [4]:

$$\mathcal{S}(A | \{E_b\}) \equiv \sum_b p_b \mathcal{S}(\rho_{A|b}). \quad (2.29)$$

Como a eq. (2.29) depende do POVM utilizado, não se pode interpretar $\mathcal{S}(A | \{E_b\})$ como a quantidade de incerteza com relação a A dado o conhecimento de B . Portanto, para construir uma versão quântica análoga à entropia condicional clássica (2.23) é necessário achar o POVM que resulte na menor incerteza possível com relação a A , ou seja, a *entropia condicional quântica* deve ser definida por:

$$\mathcal{S}(A|B) \equiv \min_{\{E_b\}} \mathcal{S}(A | \{E_b\}) = \min_{\{E_b\}} \sum_b p_b \mathcal{S}(\rho_{A|b}). \quad (2.30)$$

Usando a entropia condicional quântica definida dessa maneira pode-se definir a versão quântica da informação mútua (2.24) como:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(A : B) &\equiv \mathcal{S}(A) - \mathcal{S}(A|B) \\ &= \mathcal{S}(A) - \min_{\{E_b\}} \sum_b p_b \mathcal{S}(\rho_{A|b}) \\ &= \max_{\{E_b\}} \left(\mathcal{S}(\rho_A) - \sum_b p_b \mathcal{S}(\rho_{A|b}) \right) \end{aligned} \quad (2.31)$$

²⁴A sigla POVM refere-se a expressão em inglês “*Positive Operator-Valued Measure*”.

²⁵Os operadores $\{M_b\}$ atuam sobre o espaço de estados do sistema e satisfazem as condições: $M_b^\dagger M_b \geq 0$ e $\sum_b M_b^\dagger M_b = \mathbf{1}$. Se $|\psi\rangle$ descreve o estado do sistema, então uma medida sobre o sistema resultará no valor b com probabilidade $p(b) = \langle \psi | M_b^\dagger M_b | \psi \rangle$. Consultar o Apêndice A para maiores detalhes.

2.2.2.1 Informação Acessível

A Teoria de Informação Quântica nos permite obter uma interpretação para a expressão (2.31). Vamos supor dois personagens fictícios, Alice e Bob, e uma fonte de informação clássica representada pela variável aleatória X com distribuição de probabilidade p_x . Essa informação pode ser codificada no *ensemble* de estados quânticos $\{p_x, \rho_x\}$. Agora, Alice escolhe um estado ρ_X , pertencente ao *ensemble*, e envia para Bob. Realizando medidas descritas por elementos POVM $\{E_y\} = \{E_1, \dots, E_m\}$, Bob deseja determinar qual estado foi enviado por Alice. Os resultados das medidas são representados pela variável aleatória Y e a quantidade de informação que Bob adquiriu sobre X como resultado da medida Y é dado pela informação mútua clássica $\mathcal{J}_c(X : Y) = \mathcal{H}(X) - \mathcal{H}(X|Y)$. A eficiência com que Bob pode inferir o estado preparado por Alice é determinada pela *Informação Acessível* $\mathcal{J}_c^a(X : Y)$, definida como o máximo da informação mútua com relação a todas as estratégias possíveis de medida [12], ou seja:

$$\mathcal{J}_c^a(X : Y) \equiv \max_{\{E_b\}} (\mathcal{H}(X) - \mathcal{H}(X|Y)). \quad (2.32)$$

A estratégia ótima é tal que a quantidade de correlações (clássicas) entre X e Y seja máxima²⁶.

Um importante resultado da teoria de informação chama-se *limite de Holevo* χ [12], que estabelece um limite para a informação acessível:

$$\mathcal{J}_c^a(X : Y) \leq \mathcal{S}(\rho) - \sum_x p_x \mathcal{S}(\rho_x) = \chi(\rho), \quad (2.33)$$

onde $\rho = \sum_x p_x \rho_x$. Por outro lado [12], $\mathcal{S}(\rho) - \sum_x p_x \mathcal{S}(\rho_x) \leq \mathcal{H}(X)$, sendo a igualdade válida se, e somente se, os estados ρ_x tiverem suporte ortogonal²⁷. Portanto, se o *ensemble* utilizado para codificar a informação clássica for formado por estados não-ortogonais é impossível inferir X com base nas medidas realizadas, Y . Além disso, se Alice gerar dois estados ortogonais com distribuições de probabilidades $(p, 1 - p)$ ou $(q, 1 - q)$, Bob será capaz de identificar qual das duas distribuições foi usada por Alice. O mesmo não acontece se os dois estados

²⁶Lembre que se X e Y forem descorrelacionado então $\mathcal{H}(X|Y) = \mathcal{H}(X)$. Logo, $\mathcal{J}_c^a(X : Y) = 0$.

²⁷O suporte de um operador Hermitiano é o espaço vetorial gerado pelos autovetores associados aos autovalores não-nulos.

forem não-ortogonais [12]. Fazendo uma analogia com a expressão (2.32) pode-se interpretar a informação mútua quântica $\mathcal{J}(A : B)$ como a informação acessível sobre A *extraída localmente* através da melhor estratégia de medidas sobre B . A melhor estratégia será aquela que extraia a maior quantidade de informação causando a menor perturbação possível sobre o estado ρ^{AB} . Vamos considerar um exemplo que explora o melhor dos cenários, quando a medida não introduz nenhuma perturbação. Considere o operador densidade:

$$\rho_{AB} = \sum_j p_j \rho_j^A \otimes \Pi_j^B, \quad (2.34)$$

onde ρ_j^A são operadores densidade quaisquer e $\Pi_j^B = |j\rangle\langle j|$, sendo $\{|j\rangle\}$ um conjunto de estados ortogonais. Não é difícil ver que uma medida usando o conjunto completo de projetores $\{\Pi_k^B = |k\rangle\langle k|\}$ não afeta ρ_{AB} :

$$\sum_k \Pi_k^B \rho_{AB} \Pi_k^B = \sum_j p_j \rho_j^A \otimes \Pi_k^B \Pi_j^B \Pi_k^B = \rho_{AB}. \quad (2.35)$$

Portanto, $\rho_A = \sum_j p_j \rho_j^A$ e $\rho_{A|j} = \rho_j^A$, mostrando que $\mathcal{J}(A : B)$ coincide com o limite de Holevo $\chi(\rho_A)$. Além disso, como [12] $\mathcal{S}(\rho_{AB}) = \mathcal{H}(p_j) + \sum_j p_j \mathcal{S}(\rho_j^A)$, tem-se que:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(A : B) &= \mathcal{S}(\rho_A) - \sum_j p_j \mathcal{S}(\rho_j^A) \\ &= \mathcal{S}(\rho_A) + \mathcal{H}(p_j) - \mathcal{S}(\rho_{AB}) \\ &= \mathcal{S}(\rho_A) + \mathcal{S}(\rho_B) - \mathcal{S}(\rho_{AB}) \\ &= \mathcal{I}(A : B), \end{aligned}$$

as duas versões quânticas da informação mútua coincidem! Neste caso, a quantidade de informação que A e B possuem em comum, devido à correlação entre eles, é igual a informação clássica, isto é, pode ser obtida localmente sem perturbar o sistema [4]. O estado (2.35) é geralmente chamado de estado *clássico-quântico* [61].

É importante ressaltar que $\mathcal{J}(A : B)$ não é uma quantidade simétrica, pois a entropia condicional quântica (2.30) depende de qual subsistema está sendo medido. Caso o subsistema A também fosse descrito por uma mistura de estados ortogonais, então $\mathcal{J}(A : B) = \mathcal{J}(B : A)$. Nesta condição o limite

de Holevo $\chi(\rho_A)$ é igual a entropia de Shannon associada a distribuição de probabilidades p_j , $\chi(\rho_A) = \mathcal{H}(p_j)$. Logo, se a informação clássica fosse codificada no *ensemble* $\{p_j, \rho_j^A \otimes \Pi_j^B\}$, a distribuição p_j poderia ser inferida através da informação extraída localmente. Como ocorre na Teoria Informação Clássica, a informação acessível seria a mesma que a entropia de preparação do *ensemble* $\mathcal{H}(p_j)$.

2.2.3 Quantificando as Correlações Quânticas

Na Teoria de Informação Quântica, pode ocorrer de $\mathcal{I}(A : B) > \mathcal{J}(A : B)$, ou seja, o estado conjunto ρ_{AB} possui mais informação do que aquela que pode ser obtida localmente. Isso motivou H. Ollivier e W. H. Zurek [4] a definirem uma medida de correlações quânticas, denominada *Discórdia Quântica*, como a diferença entre as duas versões quânticas da informação mútua:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(A|B) &\equiv \mathcal{I}(A : B) - \mathcal{J}(A : B) \\ &= \mathcal{S}(B) - \mathcal{S}(A, B) + \min_{\{E_b\}} \sum_b p_b \mathcal{S}(\rho_{A|b}), \end{aligned} \quad (2.36)$$

onde a notação $\mathcal{D}(A|B)$ indica que a medida está sendo realizada sobre o subsistema B . Dessa forma, a Discórdia seria a medida da informação que não pode ser extraída localmente (sem medidas conjuntas). Existe uma diferença entre a definição (2.36) e aquela proposta inicialmente [4]. Na versão original foi utilizado um conjunto completo de medidas projetivas ortogonais²⁸ (medidas de von Neumann) ao invés de POVMs no cálculo da expressão (2.36). Essa restrição foi adotada pois, na ocasião, os autores estavam preocupados em estudar as correlações entre um sistema quântico e um aparato de medida, e estabelecer um critério para determinar quando a informação acessível seria obtida através de um conjunto de estados ortogonais, denominados *estados ponteiros* [62; 63]. O procedimento de minimização da eq. (2.36) impõe uma grande dificuldade no cálculo da Discórdia Quântica, tanto na tentativa de realizá-lo analiticamente quanto numericamente. Praticamente todos os trabalhos que envolveram o cálculo da Discórdia até o momento, inclusive os que compõe essa

²⁸Neste caso o conjunto $\{E_j\}$ deve ser tal que $E_j^2 = E_j$ e $E_j E_k = \delta_{jk} E_j$.

tese, realizaram a minimização com relação a medidas projetivas [61]. O próximo passo é investigar as limitações impostas por essa restrição.

Teorema 2.2 *A Discórdia Quântica $\mathcal{D}(A|B)$ é uma função côncava com relação ao conjunto de todos os POVMs.*

Demonstração: Para estudar a concavidade da Discórdia considera-se um estado bipartido ρ_{AB} e um POVM $\mathcal{E} = \{E_j\}$. O estado do sistema A após a medida será:

$$\rho_{A|E_j} = \frac{\text{Tr}_B(E_j \rho_{AB})}{p_{E_j}} = \frac{\text{Tr}_B(E_j \rho_{AB})}{\text{Tr}(E_j \rho_{AB})}, \quad (2.37)$$

o qual é completamente determinado pelo POVM $\mathcal{E} = \{E_j\}$. Definimos agora o funcional $F(\rho_A, \{E_j\})$ como:

$$F(\rho_A, \{E_j\}) \equiv \sum_j p_j \mathcal{S}(\rho_{A|j}). \quad (2.38)$$

Se $\mathcal{C} = \{C_j\}$ e $\mathcal{R} = \{R_j\}$ são dois POVMs então $\mathcal{E} = \lambda \mathcal{C} + (1 - \lambda) \mathcal{R}$, com $0 < \lambda < 1$, também é um POVM, pois o conjunto dos POVMs é convexo [64]. Os elementos dos POVMs se relacionam da seguinte forma:

$$E_j = \lambda C_j + (1 - \lambda) R_j. \quad (2.39)$$

Usando essa relação na eq. (2.37) temos que:

$$\rho_{A|E_j} = \frac{\text{Tr}_B(E_j \rho_{AB})}{p_{E_j}} = \lambda \frac{p_{C_j} \rho_{A|C_j}}{p_{E_j}} + (1 - \lambda) \frac{p_{R_j} \rho_{A|R_j}}{p_{E_j}}, \quad (2.40)$$

onde $p_{E_j} = \lambda p_{C_j} + (1 - \lambda) p_{R_j}$. Portanto, substituindo (2.40) na expressão (2.38) e usando o fato que a entropia de von Neumann é uma função côncava²⁹:

$$\begin{aligned} F(\rho_A, \{E_j\}) &= \sum_j p_j \mathcal{S}(\rho_{A|j}) \\ &\geq \sum_j [\lambda p_{C_j} \mathcal{S}(\rho_{A|C_j}) + (1 - \lambda) p_{R_j} \mathcal{S}(\rho_{A|R_j})] \\ &= \lambda F(\rho_A, \{C_j\}) + (1 - \lambda) F(\rho_A, \{R_j\}). \end{aligned}$$

Esse resultado mostra que $F(\rho_A, \{E_j\})$ é côncava e como $\mathcal{D}(A|B) = \mathcal{S}(B) - \mathcal{S}(A, B) + \min_{\{E_j\}} F(\rho_A, \{E_j\})$ isso garante que a Discórdia Quântica também é uma função côncava com relação ao conjunto dos POVMs.

²⁹Se ρ_1 e ρ_2 são dois operadores densidade e $0 < \lambda < 1$ então $\mathcal{S}(\lambda \rho_1 + (1 - \lambda) \rho_2) \geq \lambda \mathcal{S}(\rho_1) + (1 - \lambda) \mathcal{S}(\rho_2)$ [12].

□

Como os mínimos de uma função côncava definida sobre um conjunto convexo são os pontos extremos deste conjunto³⁰, o POVM que minimiza a Discórdia é um *ponto extremo*³¹ do conjunto de todos os POVMs. Na Ref. [64], G. M. D’Ariano e colaboradores realizaram um estudo detalhado sobre o conjunto dos POVMs e mostraram que um ponto extremo deste conjunto, para um sistema de dimensão d , possui no máximo d^2 elementos. Além disso, eles mostraram também que os extremos de um sistema de dois qubits são medidas projetivas, isto é, o POVM $\{E_j\}$ que minimiza a Discórdia tem no máximo 4 elementos e $E_j^2 = E_j$. Entretanto, as medidas projetivas não seriam necessariamente *ortogonais*. Recentemente foi demonstrado que para operadores densidade de $rank^{32}-2$ bastariam dois projetores ortogonais para minimizar a Discórdia [66], enquanto que para operadores densidade de $rank-3$ ou -4 o mínimo pode ser atingido por um POVM de três ou quatro elementos não-ortogonais. Porém, segundo resultados numéricos, além de serem improváveis, os valores da Discórdia seriam muito próximos daqueles obtidos através da minimização com dois projetores ortogonais³³ [66]. Outros indícios numéricos apontando a eficiência no uso de projetores ortogonais foram obtidos na Ref. [67]. No caso de operadores densidade na forma X [veja eq. (2.15)] com ρ_{ij} reais³⁴, a minimização acontece apenas para projetores ortogonais ou POVMs com três elementos [67]. Embora não sejam resultados definitivos, eles fornecem uma boa perspectiva para o cálculo da Discórdia através de projetores ortogonais em sistemas bipartidos de dimensão 2.

O objetivo agora é determinar a forma dos operadores densidade com Discórdia Quântica nula. Para tanto, primeiramente vamos demonstrar que a Discórdia é uma função não-negativa.

³⁰Ver o Teorema 32.3 e o Corolário 32.3.1 da Ref. [65].

³¹Um conjunto convexo \mathcal{C} é um conjunto fechado com relação a combinações lineares convexas, ou seja, se $0 < \lambda < 1$ e $C_1, C_2 \in \mathcal{C}$ então $\lambda C_1 + (1 - \lambda)C_2 \in \mathcal{C}$. Um ponto extremo $C_e \in \mathcal{C}$ é um ponto que não pode ser escrito como combinação linear convexa de outros dois elementos de \mathcal{C} .

³²O *rank* de um operador corresponde ao número de autovalores não-nulos.

³³Os autores realizaram simulações com matrizes aleatórias de $rank-3$ e -4 e observaram que os desvios mais significativos eram da ordem de 10^{-5} .

³⁴Todos os operadores densidade presentes nesta tese satisfazem essa condição.

Teorema 2.3 *Se ρ_{AB} é um operador densidade de um sistema quântico bipartido, então $\mathcal{D}(A|B)(\rho_{AB}) \geq 0$.*

Demonstração: Seja ρ_{AB} um operador densidade e $\{\Pi_j = |e_j\rangle\langle e_j|\}$ um conjunto completo de projetores ortogonais atuando sobre o sistema B . Vamos considerar um subsistema adicional C que interage com o subsistema B através do operador unitário U definido como $U|e_j\rangle \otimes |0\rangle = |e_j\rangle \otimes |c_j\rangle$, onde $|0\rangle$ e $|c_j\rangle$ denotam estados de C . O uso de projetores ortogonais não limita a demonstração, tendo em vista que o Teorema de Neumark [68] permite representar um POVM atuando sobre um sistema de dimensão d por meio de projetores ortogonais atuando em um sistema de dimensão $N > d$. O estado inicial do sistema ABC é dado por $\rho_{ABC} = \rho_{AB} \otimes |0\rangle\langle 0|$. O estado após a ação da transformação unitária é:

$$\rho'_{ABC} = \sum_{j,k} \langle e_j | \rho_{AB} | e_k \rangle \otimes |e_j\rangle\langle e_k| \otimes |f_j\rangle\langle f_k|. \quad (2.41)$$

Como a entropia associada a um operador densidade depende apenas dos seus autovalores e os autovalores não são afetados por uma transformação unitária³⁵ (apenas os autovetores), tem-se que $\mathcal{S}(\rho'_{ABC}) = \mathcal{S}(\rho_{ABC})$. Por outro lado, $\mathcal{S}(\rho_{ABC}) = \mathcal{S}(\rho_{AB})$ [12], portanto $\mathcal{S}(\rho'_{ABC}) = \mathcal{S}(\rho_{AB})$. Ainda, da equação (2.41) são obtidas as seguintes expressões:

$$\rho'_{AB} = \sum_j p_j \rho_{A|j} \otimes |e_j\rangle\langle e_j| \Rightarrow \mathcal{S}(\rho'_{AB}) = \mathcal{H}(p_j) + \sum_j p_j \mathcal{S}(\rho_{A|j}), \quad (2.42)$$

$$\rho'_{BC} = \sum_{j,k} |e_j\rangle\langle e_j| \rho_B |e_k\rangle\langle e_k| \Rightarrow \mathcal{S}(\rho'_{BC}) = \mathcal{S}(\rho_B), \quad (2.43)$$

$$\rho'_B = \sum_j p_j |e_j\rangle\langle e_j| \Rightarrow \mathcal{S}(\rho'_B) = \mathcal{H}(p_j), \quad (2.44)$$

lembrando que $p_j \rho_{A|j} = \text{Tr}_B(\rho_{AB} \Pi_j) = \langle e_j | \rho_{AB} | e_j \rangle$ e $p_j = \text{Tr}_B(\rho_{AB} \Pi_j)$. O ponto chave desta demonstração é a propriedade de subaditividade forte [12] da entropia de von Neumann, que implica na seguinte desigualdade:

$$\mathcal{S}(\rho'_{ABC}) + \mathcal{S}(\rho'_B) \leq \mathcal{S}(\rho'_{AB}) + \mathcal{S}(\rho'_{BC}), \quad (2.45)$$

que pode ser reescrita usando as equações acima:

$$\mathcal{S}(\rho_{AB}) \leq \sum_j p_j \mathcal{S}(\rho_{A|j}) + \mathcal{S}(\rho_B), \quad (2.46)$$

³⁵Seja \hat{A} um operador e U uma transformação unitária. Se $|v\rangle$ é um autovetor de \hat{A} associado ao autovalor λ , ou seja, $\hat{A}|v\rangle = \lambda|v\rangle$, então $\hat{A}U^\dagger U|v\rangle = \lambda|v\rangle \Rightarrow U\hat{A}U^\dagger U|v\rangle = \lambda U|v\rangle$. Logo, $U|v\rangle$ é um autovetor de $U\hat{A}U^\dagger$ associado ao mesmo autovalor λ .

que implica na desigualdade:

$$\mathcal{S}(\rho_B) - \mathcal{S}(\rho_{AB}) \geq \sum_j p_j \mathcal{S}(\rho_{A|j}). \quad (2.47)$$

Como essa desigualdade é satisfeita para qualquer medida, ela permanece válida para a medida que minimiza $\sum_j p_j \mathcal{S}(\rho_{A|j})$. Logo, tem-se que $\mathcal{D}(A|B)(\rho_{AB}) \geq 0$.

□

Note que segundo esse Teorema, a condição para que Discórdia Quântica seja nula é a validade da igualdade na expressão (2.47). Dito de outra forma, termos $\mathcal{D}(A|B)(\rho_{AB}) = 0$ se, e somente se, existir uma medida que transforme a subaditividade forte (eq. (2.45)) numa igualdade. A forma dos estados que garantem a igualdade da subaditividade forte é obtida através de um Lema, demonstrado por Hayden e colaboradores [69]. Usando esse Lema, A. Datta [70] demonstrou o seguinte Teorema:

Teorema 2.4 *Se ρ_{AB} é um operador densidade de um sistema quântico bipartido, então $\mathcal{D}(A|B)(\rho_{AB}) = 0$ se, e somente se,*

$$\rho_{AB} = \sum_j p_j \rho_j^A \otimes |j\rangle_B \langle j|, \quad (2.48)$$

onde ρ_j^A são operadores densidade e $|j\rangle_B$ formam um conjunto de estados ortogonais.

Anteriormente já havíamos mostrado que estados dessa forma satisfazem $\mathcal{I}(A : B) = \mathcal{J}(A : B)$ (Discórdia nula), mas com o resultado de A. Datta [70] pode-se concluir que todos os estados com Discórdia nula terão essa forma. Analogamente, se as medidas forem realizadas no sistema A ao invés do sistema B então os estados com discórdia nula poderão ser escritos como:

$$\rho_{AB} = \sum_j p_j |j\rangle_A \langle j| \otimes \rho_j^B. \quad (2.49)$$

Portanto, se $\mathcal{D}(A|B) = \mathcal{D}(B|A) = 0$ o estado ρ_{AB} terá a forma da equação (2.17). Nesta tese todos os estados satisfazem a condição $\mathcal{D}(A|B) = \mathcal{D}(B|A)$ e portanto vamos denotar a Discórdia Quântica associada ao operador densidade

ρ_{AB} simplesmente por $D(\rho_{AB})$. Ainda, para operadores densidade da forma X [veja eq. 2.15], a Discórdia será nula [71] quando *i*) $\rho_{14} = \rho_{23} = 0$ ou *ii*) $|\rho_{14}| = |\rho_{23}|$, $\rho_{11} = \rho_{22}$, e $\rho_{33} = \rho_{44}$.

Os resultados apresentados até aqui nos mostraram que existem correlações quânticas mesmo para estados separáveis. Embora isso seja verdade para estados mistos, o mesmo não acontece no caso de estados puros. Para ver isso vamos usar o fato de que todo estado puro $|\psi\rangle$ de um sistema AB pode ser escrito como³⁶:

$$|\psi\rangle = \sum_j \lambda_j |j_A\rangle \otimes |j_B\rangle, \quad (2.50)$$

onde $|j_{A(B)}\rangle$ são estados ortogonais de sistema $A(B)$ e $\lambda_j \geq 0$ com $\sum_j \lambda_j^2 = 1$. Portanto, para minimizar a expressão $\sum_b p_b \mathcal{S}(\rho_{A|b})$ basta realizar as medidas com o conjunto completo de projetores $\{|j_B\rangle\langle j_B|\}$. Neste caso $\rho_{A|b}$ será um estado puro, logo $\sum_b p_b \mathcal{S}(\rho_{A|b}) = 0$. Ainda, como $|\psi\rangle$ é puro tem-se também que $\mathcal{S}(A, B) = 0$. Aplicando estes resultados na equação (2.36), conclui-se que $\mathcal{D}(A|B) = \mathcal{S}(B)$, ou seja, para estados puros a Discórdia Quântica coincide com a entropia de emaranhamento.

A forma dos estados com Discórdia nula, eqs. (2.48) e (2.49), deixa claro o papel fundamental do princípio de superposição na existência de correlações quânticas. Ele nos permite entender também porque a maioria dos estados bipartidos exibirá correlações com características não-clássicas. Com base na equação (2.48), um estado com Discórdia igual a zero exige que pelo menos um dos subsistemas seja descrito por um *ensemble* de estados ortogonais $\{|j\rangle\}$. Assumindo um sistema de dimensão 2, cada elemento do *ensemble* pode ser escrito na base computacional como $|j\rangle = \alpha_j |0\rangle + \beta_j |1\rangle$ com $|\alpha_j|^2 + |\beta_j|^2 = 1$. Portanto, não é difícil ver que ortogonalidade entre os estados impõe fortes restrições sobre os parâmetros α_j e β_j . Além disso, qualquer perturbação em um destes parâmetros pode invalidar a condição de ortogonalidade, levando a criação de correlações quânticas.

³⁶Essa resultado chama-se Decomposição de Schmidt [12].

Capítulo 3

Dinâmica de Correlações

Quânticas em Sistemas Quânticos

Abertos

Sistemas isolados representam uma idealização de sistemas reais¹. Em geral, os sistemas físicos não estão isolados dos efeitos do meio-ambiente resultando, por exemplo, na troca de energia e partículas. Um exemplo deste fato é a onipresença do vácuo quântico. Mesmo quando é possível isolar um único átomo das excitações à sua volta, a energia de ponto-zero associada ao vácuo quântico, inexistente no vácuo clássico, irá induzir um processo dissipativo no átomo - a emissão espontânea [13]. O vácuo quântico atua como um reservatório térmico a temperatura $T = 0K$ e a sua interação com o átomo induz uma dinâmica de relaxação que leva o átomo para o seu estado fundamental. A interação entre o sistema de interesse e o meio-ambiente (ou reservatório) impõe um grande obstáculo para a computação e informação quântica, pois esta interação introduz uma perda de coerência quântica, responsável pela eficiência de muitos protocolos desenvolvidos nestas áreas [12]. Devido à decoerência esta interação exerce uma grande influência sobre um poderoso recurso computacional:

¹Na prática, sistemas isolados são apenas uma idealização que fornecem uma boa aproximação quando as escalas de tempo dos processos de dissipação e decoerência, perda de coerência quântica, são muito longos quando comparados com a escala de tempo da dinâmica unitária do sistema.

as correlações quânticas. Um exemplo drástico dos efeitos do meio-ambiente sobre as correlações quânticas é a *morte súbita do emaranhamento* (ESD), ilustrado por Yu e Eberly [14] e observado experimentalmente, por exemplo, por M. P. Almeida *et al.* [18]. Como demonstrado na Ref. [14], o emaranhamento entre dois qubits não-interagentes acoplados a banhos dissipativos independentes pode desaparecer subitamente, diferente da decoerência associada a cada qubit, cujo decaimento é exponencial. A ocorrência deste fenômeno depende tanto da condição inicial quanto do tipo de interação entre o sistema e o reservatório [15–17; 19].

O objetivo deste capítulo é investigar como a dinâmica da Discórdia Quântica e do Emaranhamento de dois qubits não-interagentes é afetada pelos distintos tipos de erros introduzidos pela interação com o meio-ambiente. Neste contexto, o nosso principal objetivo consiste em verificar o que ocorre com a Discórdia Quântica nos casos em que observa-se a morte súbita do emaranhamento. Nosso estudo será dividido em duas partes: dinâmicas markovianas e não-markovianas.

3.1 Dinâmica Markoviana

No caso markoviano, a dinâmica do operador densidade do sistema $\rho(t)$ é obtida através de uma equação diferencial de primeira-ordem denominada *equação mestra*. Esta equação é deduzida no Apêndice B mediante a *aproximação de Born*, que é válida quando a interação entre o sistema e o reservatório é suficientemente fraca. Além disso, no regime markoviano, o tempo característico do sistema é muito maior que o tempo associado ao decaimento das correlações entre as variáveis do reservatório. Dessa forma, toda a informação transferida para o meio-ambiente é rapidamente distribuída entre os seus graus de liberdade, ou seja, a informação não retorna para o sistema. Como demonstrado no Apêndice B, a equação mestra associada a um único qubit, descrito pelo Hamiltoniano $\hat{H}_S = \frac{1}{2}\omega_0\hat{\sigma}_z$, interagindo com N_R reservatórios térmicos independentes descritos pelo Hamiltoniano $\hat{H}_R = \sum_{j=1}^{N_R} \hat{H}_{R_j} = \sum_{j=1}^{N_R} \sum_k \omega_{k,j} \hat{b}_{k,j}^\dagger \hat{b}_{k,j}$, é dada pela seguinte

expressão:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}\rho(t) &= -i \left[\hat{H}_S, \rho(t) \right] \\
 &+ \sum_j \gamma_j(0) \left[\hat{A}_j(0)\rho(t)\hat{A}_j^\dagger(0) - \frac{1}{2} \left\{ \hat{A}_j^\dagger(0)\hat{A}_j(0), \rho(t) \right\} \right] \\
 &+ 2\pi \sum_j \sum_{\omega>0} f_j(\omega) [1 + N_j(\omega)] \left[\hat{A}_j(\omega)\rho(t)\hat{A}_j^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ \hat{A}_j^\dagger(\omega)\hat{A}_j(\omega), \rho(t) \right\} \right] \\
 &+ 2\pi \sum_j \sum_{\omega>0} f_j(\omega) N_j(\omega) \left[\hat{A}_j^\dagger(\omega)\rho(t)\hat{A}_j(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ \hat{A}_j(\omega)\hat{A}_j^\dagger(\omega), \rho(t) \right\} \right].
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

onde $f_j(\omega)$ é a densidade espectral, $\gamma_j(0)$ é a taxa de defasagem, $N_j(\omega)$ é o número médio de excitações do j -ésimo reservatório e $\hat{A}_j(\omega)$ são os operadores que descrevem a interação entre o sistema e o j -ésimo reservatório, representada pelo Hamiltoniano:

$$\hat{H}_{SR_j} = \hat{A}_j \otimes \sum_k (g_{k,j} \hat{b}_{k,j} + g_{k,j}^* \hat{b}_{k,j}^\dagger), \tag{3.2}$$

com $g_{k,j}$ denotando o acoplamento entre o sistema e o k -ésimo oscilador do j -ésimo reservatório. O operador $\hat{A}_j(\omega)$ é definido como:

$$\hat{A}_j(\omega) = \sum_{\epsilon' - \epsilon = \omega} \Pi(\epsilon) \hat{A}_j \Pi(\epsilon'), \tag{3.3}$$

onde $\hat{H}_S |\epsilon\rangle = \epsilon |\epsilon\rangle$ e $\Pi(\epsilon)$ é o projetor associado à autoenergia ϵ . No caso de um único qubit, tem-se que:

$$\hat{A}_j(0) = |0\rangle \langle 0| \hat{A}_j |0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1| \hat{A}_j |1\rangle \langle 1|, \tag{3.4}$$

$$\hat{A}_j(\omega_0) = |0\rangle \langle 0| \hat{A}_j |1\rangle \langle 1| = \langle 0| \hat{A}_j |1\rangle \hat{\sigma}_-, \tag{3.5}$$

pois $\hat{H}_S |0\rangle = -\frac{1}{2}\omega_0 |0\rangle$ e $\hat{H}_S |1\rangle = \frac{1}{2}\omega_0 |1\rangle$.

3.1.1 Defasagem

O primeiro tipo de erro que será estudado é a *defasagem*. Neste caso, observa-se a perda de coerência quântica sem dissipação de energia, ou seja, enquanto as coerências do operador densidade (na base de autoestados de \hat{H}_S) tentem a zero as populações permanecem inalteradas durante a evolução temporal. Este efeito pode ser modelado através do reservatório de fase, descrito pelo

Hamiltoniano (3.2) com $\hat{A} = \hat{\sigma}_z$. Portanto, como $\hat{A}(0) = \hat{\sigma}_z$ e $\hat{A}(\omega_0) = 0$, a equação mestra (3.1) na representação de interação assume a forma:

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \gamma [\hat{\sigma}_z\rho(t)\hat{\sigma}_z - \rho(t)], \quad (3.6)$$

onde $\gamma = \gamma(0)$ denota a taxa de defasagem (ver seção B.4 do Apêndice B). A solução desta equação é obtida facilmente:

$$\begin{aligned} \rho_{1,1}(t) &= \rho_{1,1}(0), \\ \rho_{0,0}(t) &= \rho_{0,0}(0), \\ \rho_{1,0}(t) &= \rho_{1,0}(0)e^{-2\gamma t}, \end{aligned} \quad (3.7)$$

com $\rho_{1,0}(t) = \rho_{0,1}^*(t)$. Como mencionado acima, embora as populações não sejam afetadas pela interação com o reservatório, as coerências tendem a zero exponencialmente. No apêndice B mostramos que a dinâmica do operador densidade do sistema pode ser escrita na representação de Kraus [13]:

$$\rho(t) = \sum_{\alpha} \mathcal{K}_{\alpha}\rho(0)\mathcal{K}_{\alpha}^{\dagger}, \quad (3.8)$$

onde \mathcal{K}_{α} são os operadores de Kraus. Para a defasagem os operadores de Kraus são dados por [12]:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_0 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p} \end{pmatrix}, \\ \mathcal{K}_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{p} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

onde $p = 1 - e^{-2\gamma t}$ é uma parametrização do tempo, com $p = 0$ correspondendo a $t = 0$ e $p = 1$ representando o limite $t \rightarrow \infty$. Basta um cálculo simples para mostrar que a equação (3.8) com os operadores de Kraus (3.9) é equivalente ao sistema de equações (3.7).

O uso dos operadores de Kraus facilita a generalização destes resultados para o caso de dois qubits não-interagentes acoplados a reservatórios independentes². O operador densidade destes dois qubits é determinado através da equação:

$$\rho(t) = \sum_{\alpha,\beta} \mathcal{K}_{\alpha,\beta}\rho(0)\mathcal{K}_{\alpha,\beta}^{\dagger}, \quad (3.10)$$

²Para maiores detalhes consulte a última seção do Apêndice B.

com $\mathcal{K}_{\alpha,\beta} = \mathcal{K}_\alpha \otimes \mathcal{K}_\beta$, onde \mathcal{K}_α são os operadores de Kraus associados a um único qubit. Portanto, no caso em que cada qubit está acoplado a um reservatório de fase a equação (3.10) pode ser escrita em termos dos operadores de Kraus (3.9):

$$\rho(t) = \mathcal{K}_{1,1}\rho(0)\mathcal{K}_{1,1}^\dagger + \mathcal{K}_{1,0}\rho(0)\mathcal{K}_{1,0}^\dagger + \mathcal{K}_{0,1}\rho(0)\mathcal{K}_{0,1}^\dagger + \mathcal{K}_{0,0}\rho(0)\mathcal{K}_{0,0}^\dagger.$$

Considerando como estado inicial dos dois qubits o estado de Werner:

$$\rho(0) = \frac{(1-\alpha)}{4}\mathbf{1} + \alpha|\psi^-\rangle\langle\psi^-|, \quad (3.11)$$

com $\alpha \in [0, 1]$ e $|\psi^-\rangle = (|01\rangle - |10\rangle)/\sqrt{2}$, a equação anterior passa a ser dada por:

$$\rho(t) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1-\alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+\alpha & -2\alpha(1-p) & 0 \\ 0 & -2\alpha(1-p) & 1+\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-\alpha \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

lembrando que $p = 1 - e^{-2\gamma t}$. Para este estado, a concorrência, equação (2.16), assume a forma:

$$C(\rho) = \max \left\{ 0, \alpha \left(\frac{3}{2} - p \right) - \frac{1}{2} \right\}. \quad (3.13)$$

Para $\alpha < 1/3$ o estado inicial é separável, logo $C(\rho) = 0$ independente do valor de p . Quando o estado inicial é maximamente emaranhado, $\alpha = 1$, tem-se que $C(\rho) = 1 - p = e^{-2\gamma t}$, mostrando que o emaranhamento tende a zero apenas assintoticamente. Agora, se $1/3 < \alpha < 1$ a Concorrência (3.13) atinge o valor zero para um tempo finito $p_c = (3\alpha - 1)/2\alpha$, caracterizando a morte súbita do emaranhamento, como ilustrado na Figura (3.1a).

A Discórdia Quântica referente ao operador densidade (3.12) é calculada analiticamente através do resultado obtido por S. Luo [72]:

$$D(\rho) = \frac{F(a+b) + F(a-b)}{4} - \frac{F(a)}{2}, \quad (3.14)$$

onde $F(x) = x \log_2 x$, $a = 1 - \alpha$, e $b = 2\alpha(1 - p)$. Conforme a Figura (3.1b), a Discórdia atinge o valor zero apenas assintoticamente, para todo $\alpha > 0$. Este resultado mostra que a Discórdia resiste aos efeitos do reservatório de fase, enquanto o emaranhamento desaparece completamente para um tempo finito. Neste caso, $D(\rho) = 0$ somente quando as coerências do operador densidade (3.12) são iguais a zero, ou seja, quando $\alpha = 0$ ou $\alpha \neq 0$ e $p = 1$.

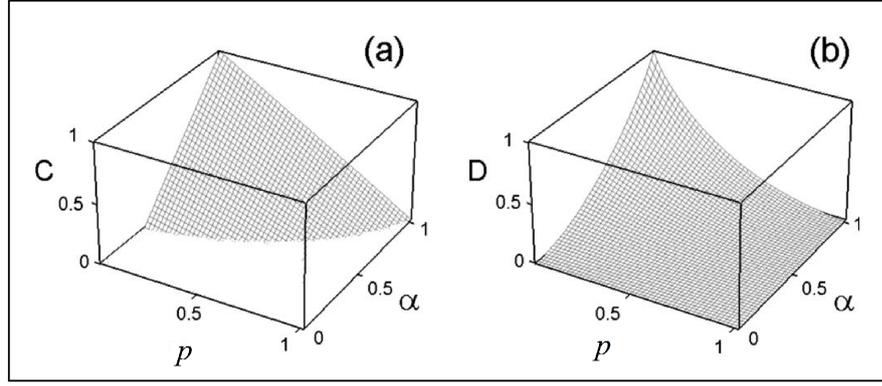


FIGURA 3.1: Dinâmica das correlações quânticas entre dois qubits não-interagentes sujeitos a ação de reservatórios de fase independentes. (a) Concorrência C e (b) Discórdia Quântica D em função do parâmetro α e do tempo parametrizado p . O estado inicial adotado foi o estado de Werner $\rho(0) = (1 - \alpha)\mathbf{1}/4 + \alpha|\psi^-\rangle\langle\psi^-|$, com $\alpha \in [0, 1]$ e $|\psi^-\rangle = (|01\rangle - |10\rangle)/\sqrt{2}$.

3.1.2 Atenuação de Amplitude Generalizada

No caso anterior investigamos como a decoerência afeta as correlações quânticas quando não há uma troca de energia entre o sistema e o reservatório térmico. Esta troca de energia pode ser introduzida na dinâmica de um único qubit se adotarmos $\hat{A} = \hat{\sigma}_x$, tendo em vista que $[\hat{H}_S, \hat{\sigma}_x] \neq 0$. Com isso, $\hat{A}(0) = 0$ e $\hat{A}(\omega_0) = \hat{\sigma}_- = |0\rangle\langle 1|$, logo a equação mestra (3.1) na representação de interação pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) &= 2\pi f(\omega_0) [1 + N(\omega_0)] \left[\hat{\sigma}_-\rho(t)\hat{\sigma}_+ - \frac{1}{2} \{ \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-, \rho(t) \} \right] \\ &+ 2\pi f(\omega_0)N(\omega_0) \left[\hat{\sigma}_+\rho(t)\hat{\sigma}_- - \frac{1}{2} \{ \hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+, \rho(t) \} \right], \end{aligned} \quad (3.15)$$

com

$$N(\omega_0) = \frac{1}{e^{\frac{\omega_0}{kT}} - 1}, \quad (3.16)$$

onde T é a temperatura do reservatório e k a constante de Boltzmann. Esta equação mestra descreve a transição $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$, proporcional a $1 + N(\omega_0)$, e a transição $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$, proporcional a $N(\omega_0)$. Observa-se assim que em $T = 0K$ ($N(\omega_0) = 0$) apenas as emissões espontâneas são permitidas, ou seja, o reservatório introduz um efeito dissipativo no sistema. Por outro lado, para $T > 0$ o sistema pode tanto fornecer quanto absorver energia do reservatório térmico. O

tipo de erro introduzido no qubit por esta interação é conhecido como *Atenuação de Amplitude Generalizada* [12].

Na base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, a equação mestra (3.15) é descrita em termos do seguinte conjunto de equações diferenciais acopladas:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\rho_{1,1}(t) &= -\Gamma(1+N)\rho_{1,1}(t) + \Gamma N\rho_{0,0}(t), \\ \frac{d}{dt}\rho_{0,0}(t) &= \Gamma(1+N)\rho_{1,1}(t) - \Gamma N\rho_{0,0}(t), \\ \frac{d}{dt}\rho_{0,1}(t) &= -\frac{\Gamma}{2}(2N+1)\rho_{0,1}(t),\end{aligned}$$

onde $\Gamma = 2\pi f(\omega_0)$ e $N = N(\omega_0)$. A solução deste sistema de equações é dada por:

$$\begin{aligned}\rho_{1,1}(t) &= \frac{N}{2N+1} + \frac{e^{-\Gamma(2N+1)t}}{2N+1} [(N+1)\rho_{1,1}(0) - N\rho_{0,0}(0)], \\ \rho_{0,0}(t) &= \frac{N+1}{2N+1} - \frac{e^{-\Gamma(2N+1)t}}{2N+1} [(N+1)\rho_{1,1}(0) - N\rho_{0,0}(0)], \\ \rho_{0,1}(t) &= e^{-\frac{\Gamma}{2}(2N+1)t}\rho_{0,1}(0).\end{aligned}\quad (3.17)$$

Note que no regime estacionário ($t \rightarrow \infty$) a coerência $\rho_{0,1}(t)$ tende a zero, enquanto que as populações do estado fundamental $\rho_{0,0}(t)$ e do estado excitado $\rho_{1,1}(t)$ são determinadas apenas pela temperatura do reservatório, sendo independentes do estado inicial do qubit. Para $T = 0K$ o único estado populado no regime estacionário é o estado fundamental $|0\rangle$.

Novamente, pode-se representar a dinâmica do operador densidade $\rho(t)$, descrita pela equação mestra (3.15), em termos dos operadores de Kraus (3.8).

Para tanto são necessários quatro operadores de Kraus [12]:

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_0 &= \sqrt{q} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p} \end{pmatrix}, & \mathcal{K}_1 &= \sqrt{q} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{p} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \mathcal{K}_2 &= \sqrt{1-q} \begin{pmatrix} \sqrt{1-p} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & \mathcal{K}_3 &= \sqrt{1-q} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sqrt{p} & 0 \end{pmatrix},\end{aligned}\quad (3.18)$$

onde $p = 1 - e^{-\Gamma(2N+1)t}$ e $q = (N+1)/(2N+1)$. O caso $T = 0K$ ($N = 0$) corresponde a $q = 1$, enquanto que o regime $T \rightarrow \infty$ é obtido usando $q = 1/2$. Aplicando o mesmo procedimento do seção anterior, podemos utilizar estes operadores de Kraus e a equação (3.10) para determinar a dinâmica de dois

qubits não-interagentes em que cada qubit está sujeito a atenuação de amplitude generalizada. Portanto, utilizando a condição inicial $\rho(0) = |\phi\rangle\langle\phi|$ com:

$$|\phi\rangle = \sqrt{1-\alpha}|00\rangle + \sqrt{\alpha}|11\rangle, \quad \alpha \in [0, 1], \quad (3.19)$$

os elementos não-nulos do operador densidade $\rho(t)$ obtidos através da equação (3.10), na base $\{|1\rangle = |00\rangle, |2\rangle = |01\rangle, |3\rangle = |10\rangle, |4\rangle = |11\rangle\}$, são:

$$\begin{aligned} \rho_{1,1}(t) &= \rho_{1,1}(0) \{1 - p[2(1-q) - p(1-2q)]\} + p^2 q^2, \\ \rho_{2,2}(t) &= \rho_{3,3}(t) = p \{ \rho_{1,1}(0)(1-2q)(1-p) + q(1-pq) \}, \\ \rho_{4,4}(t) &= 1 - \rho_{1,1}(t) - 2\rho_{2,2}(t), \\ \rho_{1,4}(t) &= \rho_{4,1}(t) = \rho_{1,4}(0)(1-p). \end{aligned} \quad (3.20)$$

O comportamento das correlações quânticas em função do parâmetro α e do tempo parametrizado p está contemplado na Figura (3.2). Nesta figura foram escolhidos dois regimes de temperatura: $q = 1$, correspondendo ao caso $T = 0K$, e $q = 2/3$.

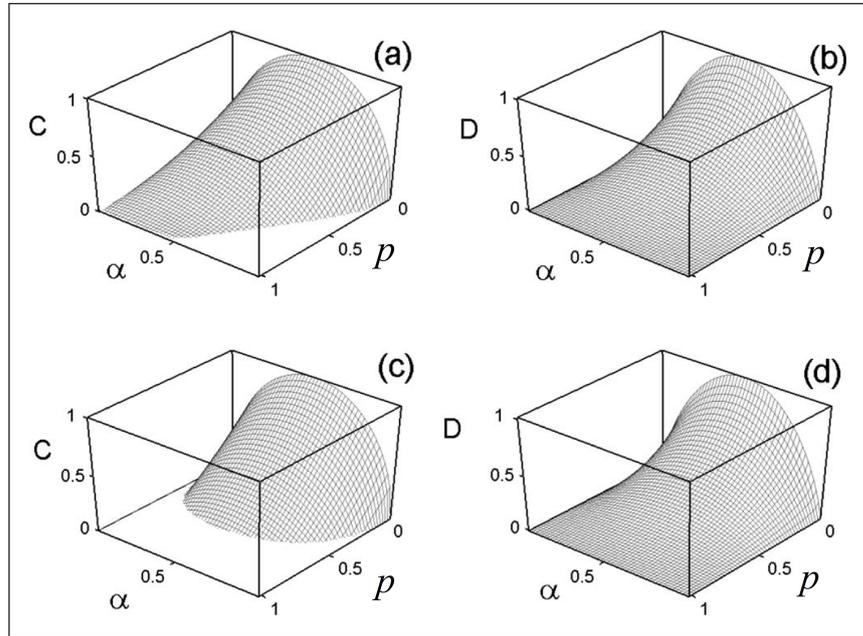


FIGURA 3.2: Dinâmica das correlações quânticas entre dois qubits não-interagentes sujeitos a ação da atenuação de amplitude generalizada. Concorrência C em função de α e p para (a) $q = 1$ e (c) $q = 2/3$. Discórdia Quântica D em função de α e p para (b) $q = 1$ e (d) $q = 2/3$. Utilizou-se o estado inicial $\rho(0) = |\phi\rangle\langle\phi|$ com $|\phi\rangle = \sqrt{1-\alpha}|00\rangle + \sqrt{\alpha}|11\rangle$ onde $\alpha \in [0, 1]$.

Como $\rho_{2,3}(t) = 0$, a Concorrência associada ao operador densidade $\rho(t)$, definido pelos elementos (3.20), é dada por $C(\rho) = 2 \max\{0, \Gamma_1\}$ com:

$$\Gamma_1 = \sqrt{\alpha(1-\alpha)(1-p)} - p[(1-\alpha)(1-2q)(1-p) + p(1-pq)]. \quad (3.21)$$

Para $q = 1$ tem-se que $C(\rho) > 0$ para todo $t > 0$ ($p < 1$) desde que $0 < \alpha < 1/2$, como pode ser observado na Figura (3.2a). Entretanto, se $\alpha > 1/2$ a Concorrência assume o valor zero para valores finitos de p , ou seja, o emaranhamento desaparece para t finito. Note também que conforme aumentamos α a Concorrência vai a zero mais rapidamente. Agora, levando em conta os efeitos térmicos, a ação do meio-ambiente torna-se mais drástica, por exemplo, para $q = 2/3$ [Fig. (3.2c)] o emaranhamento tende a zero para algum valor finito de p independente da condição inicial, determinada pelo parâmetro α . Em ambos os casos a Concorrência apresenta um decaimento monotônico para qualquer estado de superposição inicial, ou seja, para valores de α diferentes de 0 e 1. Este comportamento é uma característica proveniente do aspecto markoviano da dinâmica do sistema [73].

Como constatado na seção anterior, a Discórdia Quântica não desaparece subitamente, mesmo quando a temperatura do reservatório é maior que zero. Segundo as Figs. (3.2b) e (3.2d), a Discórdia exibe um decaimento monotônico para todo $\alpha \neq 0, 1$ e para $q = 1, 2/3$, anulando-se apenas assintoticamente. Quanto $\alpha = 0$ ou $\alpha = 1$ o estado inicial é puro e separável, logo $D(\rho) = 0$ independente de p . Para gerar os gráficos da Discórdia presentes na Figura (3.2), fez-se uso de cálculo numérico para executar o procedimento de minimização definido na equação (2.36).

3.1.3 Despolarização

A interação com o meio-ambiente pode introduzir na dinâmica de um qubit um importante tipo de ruído quântico conhecido como *despolarização*. A ação deste ruído consiste em levar o estado do qubit para o estado de mistura estatística máxima $\rho = \mathbf{1}/2$, onde $\mathbf{1}$ é a matriz identidade. Se $\rho(0)$ denota o estado inicial do qubit, o operador densidade em função do tempo parametrizado

p é dado pela seguinte expressão:

$$\rho(p) = p\frac{\mathbf{1}}{2} + (1-p)\rho(0). \quad (3.22)$$

Entretanto, para um operador densidade arbitrário ρ :

$$\frac{\mathbf{1}}{2} = \frac{1}{4} (\rho + \hat{\sigma}_x \rho \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_y \rho \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_z \rho \hat{\sigma}_z), \quad (3.23)$$

onde $\hat{\sigma}_{x,y,z}$ são as matrizes de Pauli. Substituindo este resultado na equação (3.22):

$$\rho(p) = \left(1 - \frac{3p}{4}\right) \rho(0) + \frac{p}{4} (\hat{\sigma}_x \rho(0) \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_y \rho(0) \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_z \rho(0) \hat{\sigma}_z), \quad (3.24)$$

permitindo utilizar a representação de Kraus (3.8) para caracterizar o efeito de despolarização:

$$\rho(p) = \sum_{\alpha=0}^3 \mathcal{K}_\alpha \rho(0) \mathcal{K}_\alpha^\dagger, \quad (3.25)$$

onde os operadores de Kraus são:

$$\mathcal{K}_0 = \left(1 - \frac{3p}{4}\right) \mathbf{1} \quad , \quad \mathcal{K}_1 = \frac{\sqrt{p}}{2} \hat{\sigma}_x \quad , \quad \mathcal{K}_2 = \frac{\sqrt{p}}{2} \hat{\sigma}_y \quad , \quad \mathcal{K}_3 = \frac{\sqrt{p}}{2} \hat{\sigma}_z. \quad (3.26)$$

Para determinar a dinâmica de dois qubits não-interagentes quando ambos os qubits estão sujeitos a despolarização basta substituir os operadores de Kraus (3.26) na equação (3.10). Usando a condição inicial da seção anterior, equação (3.19), os elementos não-nulos do operador densidade (3.25) são:

$$\begin{aligned} \rho_{1,1}(t) &= (1-\alpha)(1-p) + \frac{p^2}{4}, \\ \rho_{2,2}(t) &= \rho_{3,3}(t) = \frac{p}{2} \left(1 - \frac{p}{2}\right), \\ \rho_{4,4}(t) &= \alpha(1-p) + \frac{p^2}{4}, \\ \rho_{1,4}(t) &= \rho_{4,1}(t) = \sqrt{\alpha(1-\alpha)}(1-p). \end{aligned} \quad (3.27)$$

A Concorrência associada ao operador densidade ρ definido a partir do sistema de equações (3.27) é $C(\rho) = 2 \max\{0, \Gamma_1\}$ com:

$$\Gamma_1 = \sqrt{\alpha(1-\alpha)}(1-p) - \frac{p}{2} \left(1 - \frac{p}{2}\right). \quad (3.28)$$

Novamente, como pode ser observado na Figura (3.3), a morte súbita do emaranhamento acontece independente do valor de α , enquanto que a Discórdia Quântica tende a zero apenas assintoticamente, para todo $\alpha \neq 0, 1$.

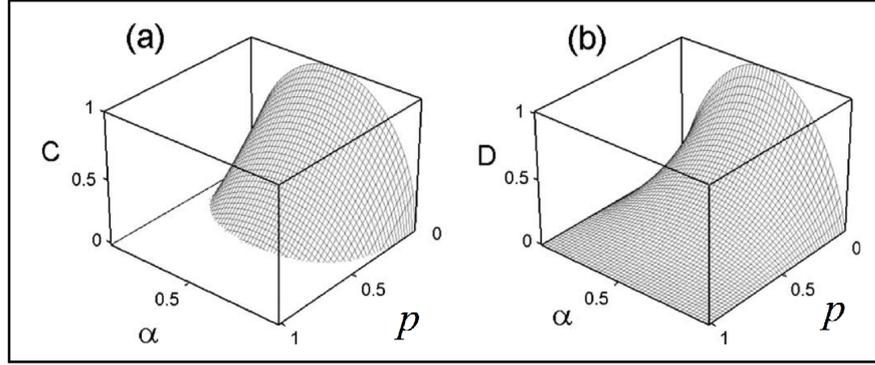


FIGURA 3.3: Dinâmica das correlações quânticas entre dois qubits não-interagentes sujeitos a despolarização. (a) Concorrência C e (b) Discórdia Quântica D em função do parâmetro α e do tempo parametrizado p . Utilizou-se o estado inicial $\rho(0) = |\phi\rangle\langle\phi|$ com $|\phi\rangle = \sqrt{1-\alpha}|00\rangle + \sqrt{\alpha}|11\rangle$ onde $\alpha \in [0, 1]$.

3.1.4 Defasagem e Atenuação de Amplitude

Como demonstrado na Figura (3.2a), o emaranhamento entre dois qubits não-interagentes sujeitos a atenuação de amplitude com $q = 1$ ($T = 0K$), não desaparece subitamente para estados iniciais com $0 < \alpha < 1/2$. Vamos analisar agora a dinâmica destes dois qubits acoplados apenas a reservatórios de fase para condições iniciais da forma (3.19). Usando a equação (3.10), os elementos não-nulos do operador densidade que descreve a dinâmica dos dois qubits são:

$$\begin{aligned}\rho_{1,1}(t) &= 1 - \alpha, \\ \rho_{4,4}(t) &= \alpha, \\ \rho_{1,4}(t) &= \rho_{4,1}(t) = \sqrt{\alpha(1-\alpha)}(1-p).\end{aligned}\tag{3.29}$$

Neste caso, a Concorrência associada a ρ é $C(\rho) = \sqrt{\alpha(1-\alpha)}(1-p)$, mostrando que o emaranhamento inicial entre os qubits torna-se nulo apenas assintoticamente, quando $p = 1$. Desta forma, fica claro que não há morte súbita do emaranhamento para $0 < \alpha < 1/2$ quando a dinâmica dos qubits é afetada pela defasagem ou pela atenuação de amplitude. Por outro lado, como constatado na Ref. [16], se cada qubit for submetido a ação conjunta da atenuação de amplitude (com $q = 1$) e da defasagem, o emaranhamento pode desaparecer subitamente para estados iniciais que não apresentavam este comportamento quando submetidos a ação de apenas um destes reservatórios. Para finalizar a nossa análise

da dinâmica markoviana das correlações quânticas vamos investigar o comportamento da Concorrência e da Discórdia Quântica neste novo cenário.

A equação mestra referente a dinâmica de um único qubit sujeito a ação conjunta dos reservatórios de fase e atenuação de amplitude é obtida através da equação (3.1) utilizando $\hat{A}_1 = \hat{\sigma}_z$ e $\hat{A}_2 = \hat{\sigma}_x$. Como $\hat{A}_1(0) = \hat{\sigma}_z$ e $\hat{A}_1(\omega_0) = 0$ e ainda $\hat{A}_2(0) = 0$ e $\hat{A}_2(\omega_0) = \hat{\sigma}_-$, a equação (3.1) na representação de interação pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \gamma[\hat{\sigma}_z\rho(t)\hat{\sigma}_z - \rho(t)] + \Gamma\left(\hat{\sigma}_-\rho(t)\hat{\sigma}_+ - \frac{1}{2}\{\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-, \rho(t)\}\right), \quad (3.30)$$

onde $\gamma = \gamma(0)$ e $\Gamma = 2\pi f(\omega_0)$. A solução desta equação é apresentada abaixo:

$$\begin{aligned} \rho_{0,0}(t) &= \rho_{0,0}(0) + \rho_{1,1}(0)(1 - e^{-\Gamma t}), \\ \rho_{1,1}(t) &= \rho_{1,1}(0)e^{-\Gamma t}, \\ \rho_{0,1}(t) &= \rho_{0,1}(0)e^{-\left(\frac{\Gamma}{2} + 2\gamma\right)t}, \end{aligned} \quad (3.31)$$

onde observa-se que a taxa de decoerência do qubit com relação aos reservatórios de fase e atenuação de amplitude, atuando ao mesmo tempo, é a soma das taxas de decoerência de cada reservatório: $\Gamma/2 + 2\gamma$.

Segundo a equação (B.67), presente no Apêndice B, é possível representar a dinâmica do operador densidade como:

$$\rho_{p,p'}(t) = \sum_{l,l'=0,1} \mathcal{M}_{pp',ll'}(t)\rho_{l,l'}(0), \quad (3.32)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{00,00}(t) &= 1 & , & & \mathcal{M}_{00,11}(t) &= 1 - e^{-\Gamma t}, \\ \mathcal{M}_{11,11}(t) &= e^{-\Gamma t} & , & & \mathcal{M}_{01,01}(t) &= \mathcal{M}_{10,10}(t) = e^{-\left(\frac{\Gamma}{2} + 2\gamma\right)t}, \end{aligned} \quad (3.33)$$

e com os termos $\mathcal{M}_{pp',ll'}(t)$ restantes iguais a zero. Assumindo que ambos os qubits apresentam a mesma dinâmica, oriunda da equação (3.30), com taxas de decaimento e defasagem idênticas, pode-se determinar a dinâmica do operador densidade do sistema constituído pelos dois qubits através da equação (B.69):

$$\rho_{pp',qq'}(t) = \sum_{l,l',r,r'=0,1} \mathcal{M}_{pq,ll'}(t)\mathcal{M}_{p'q',rr'}(t)\rho_{lr,l'r'}(0), \quad (3.34)$$

com $\mathcal{M}_{ij,kl}(t)$ definidos pelas eqs. (3.33). Usando este resultado e adotando a base $\{|1\rangle = |00\rangle, |2\rangle = |01\rangle, |3\rangle = |10\rangle, |4\rangle = |11\rangle\}$, o operador densidade do sistema para a condição inicial (3.19) é determinado pelas seguintes expressões:

$$\begin{aligned}\rho_{1,1}(t) &= 1 - \alpha(1 - p^2), \\ \rho_{2,2}(t) &= \rho_{3,3}(t) = \alpha p(1 - p), \\ \rho_{4,4}(t) &= \alpha(1 - p)^2, \\ \rho_{1,4}(t) &= \rho_{4,1}(t) = \sqrt{\alpha(1 - \alpha)}(1 - p)^2,\end{aligned}\tag{3.35}$$

assumindo $\gamma = \Gamma/4$ e usando o tempo parametrizado $p = 1 - e^{-\Gamma t}$. Na Figura (3.4) estão apresentados os gráficos da Concorrência e da Discórdia Quântica em função do parâmetro α e do tempo parametrizado p .

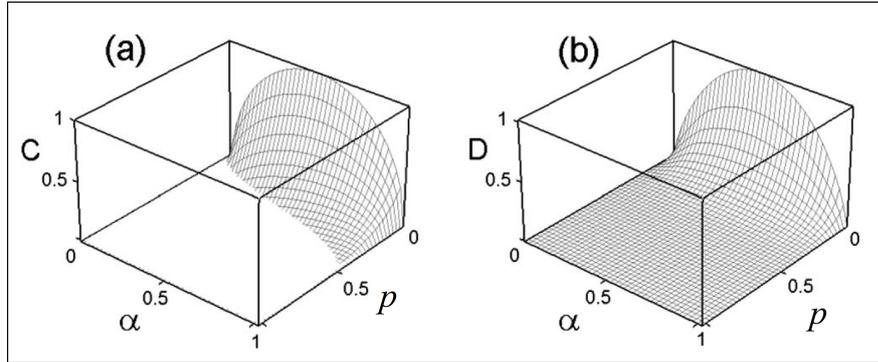


FIGURA 3.4: Dinâmica das correlações quânticas entre dois qubits não-interagentes sujeitos a ação conjunta dos reservatórios de fase e da atenuação de amplitude ($q = 1$). (a) Concorrência C e (b) Discórdia Quântica D em função do parâmetro α e do tempo parametrizado p . Utilizou-se o estado inicial $\rho(0) = |\phi\rangle\langle\phi|$ com $|\phi\rangle = \sqrt{1 - \alpha}|00\rangle + \sqrt{\alpha}|11\rangle$ onde $\alpha \in [0, 1]$.

A Figura (3.4a) mostra que a ação conjunta de dois reservatórios pode induzir a morte súbita do emaranhamento para $0 < \alpha < 1/2$, quando a ação individual de cada reservatório não possibilita a existência deste comportamento. Como mencionado acima, este resultado já havia sido observado por T. Yu e J. H. Eberly [16] para estados iniciais diferentes daquele usando em nossa análise. Por outro lado, a adição de dois reservatórios não foi suficiente para levar a um desaparecimento súbito da Discórdia Quântica, como pode ser visto na Figura (3.4b).

3.2 Dinâmica não-Markoviana

Nosso próximo passo é estudar o comportamento dinâmico da Discórdia Quântica quando a interação com o reservatório apresenta aspectos não-markovianos. Conforme a dedução da equação mestra desenvolvida no Apêndice B, para obter uma equação markoviana foi necessário assumir um acoplamento fraco entre o sistema e o reservatório. Portanto, em situações onde essa hipótese não pode ser aplicada, a dinâmica do sistema pode apresentar características não-markovianas [13; 74]. Como observado anteriormente, a evolução markoviana do emaranhamento entre dois sistemas não-interagentes acoplados a reservatórios térmicos independentes apresenta uma dependência temporal monotônica. Entretanto, B. Bellomo *et al.* [75] mostraram que este comportamento monotônico do emaranhamento é violado na presença de efeitos não-markovianos. Além do emaranhamento apresentar um comportamento oscilatório e amortecido, ele pode ressurgir subitamente após ter desaparecido completamente. Este fenômeno é conhecido como *nascimento súbito do emaranhamento* [76; 77].

Outro tópico que será abordado nesta seção refere-se ao caso em que os dois qubits não-interagentes estão acoplados ao mesmo reservatório térmico. Como discutido na Ref. [78], este reservatório coletivo induz uma interação efetiva entre os qubits, responsável por afetar consideravelmente a dinâmica do emaranhamento.

3.2.1 Reservatórios Independentes

Para determinar a dinâmica não-markoviana de dois qubits não-interagentes acoplados a reservatórios térmicos independentes vamos adotar o mesmo procedimento da seção 3.1.4. Primeiro vamos obter a dinâmica de um único qubit³, escrita na forma da equação (3.61). Feito isso, basta utilizar a equação (3.34) para determinar a dinâmica no caso de dois qubits. Nosso ponto de partida

³Para obter a dinâmica exata de um único qubit vamos adotar o modelo resolvido no capítulo 10 da Ref. [13] - um sistema de dois níveis com emissão espontânea.

é o Hamiltoniano:

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_R + \hat{H}_{SR}, \quad (3.36)$$

onde $\hat{H}_S = \omega_0 \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_-$ e $\hat{H}_R = \sum_k \omega_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k$ são os Hamiltonianos do qubit e do reservatório, respectivamente. A interação entre o qubit e o reservatório é descrita pelo Hamiltoniano:

$$\hat{H}_{SR} = \hat{\sigma}_+ \otimes \hat{B} + \hat{\sigma}_- \otimes \hat{B}^\dagger \quad \text{com} \quad \hat{B} = \sum_k g_k \hat{b}_k, \quad (3.37)$$

com g_k descrevendo o acoplamento entre o qubit e o k -ésimo modo do reservatório. Este modelo é utilizado na Ref. [13] para descrever a emissão espontânea de um átomo de dois níveis.

Agora, vamos introduzir os estados ortonormais [13]:

$$\begin{aligned} |\psi_0\rangle &= |0\rangle_S \otimes |0\rangle_R, \\ |\psi_1\rangle &= |1\rangle_S \otimes |0\rangle_R, \\ |\psi_k\rangle &= |0\rangle_S \otimes |k\rangle_R, \end{aligned} \quad (3.38)$$

onde $|0\rangle_S$ e $|1\rangle_S$ denotam, respectivamente, os estados fundamental e excitado do qubit, com $|0\rangle_S = \hat{\sigma}_- |1\rangle_S$, enquanto que $|0\rangle_R$ denota o estado de vácuo do reservatório. O estado com uma excitação no modo k é representado por $|k\rangle_R = \hat{b}_k^\dagger |0\rangle_R$.

Na representação de interação, a dinâmica da função de onda do sistema global $\phi(t)$ é obtida através da equação:

$$\frac{d}{dt} \phi(t) = -i \hat{H}_I(t) \phi(t), \quad (3.39)$$

onde

$$\hat{H}_I(t) = \hat{\sigma}_+(t) \otimes \hat{B}(t) + \hat{\sigma}_-(t) \otimes \hat{B}^\dagger(t), \quad (3.40)$$

é o Hamiltoniano (3.36) na representação de interação, com:

$$\hat{\sigma}_\pm(t) = \hat{\sigma}_\pm e^{\pm i\omega_0 t} \quad \text{e} \quad \hat{B}(t) = \sum_k g_k \hat{b}_k e^{-i\omega_k t}. \quad (3.41)$$

Como o número de excitações, $\hat{N} = \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- + \sum_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k$, é uma quantidade conservada, ou seja, $[\hat{N}, \hat{H}] = 0$, a função de onda no instante de tempo t , para um estado inicial $\phi(0)$ na forma:

$$|\phi(0)\rangle = c_0 |\psi_0\rangle + c_1 |\psi_1\rangle + \sum_k c_k |\psi_k\rangle, \quad (3.42)$$

pode ser escrita como:

$$|\phi(t)\rangle = c_0 |\psi_0\rangle + c_1(t) |\psi_1\rangle + \sum_k c_k(t) |\psi_k\rangle, \quad (3.43)$$

onde c_0 é uma constante tendo em vista que $\hat{H}_I(t) |\psi_0\rangle = 0$. Substituindo a equação (3.43) na equação (3.39) e usando a ortogonalidade dos estados (3.38), determina-se as equações de movimento para os coeficientes $c_1(t)$ e $c_k(t)$:

$$\dot{c}_1(t) = -i \sum_k g_k e^{i(\omega_0 - \omega_k)t} c_k(t), \quad (3.44)$$

$$\dot{c}_k(t) = -i g_k^* e^{-i(\omega_0 - \omega_k)t} c_1(t). \quad (3.45)$$

Assumindo que o reservatório encontra-se inicialmente no estado de vácuo, $c_k(0) = 0$, a solução formal da equação (3.44) é dada por:

$$c_k(t) = -i g_k^* \int_0^t e^{-i(\omega_0 - \omega_k)t_1} c_1(t_1) dt_1. \quad (3.46)$$

Substituindo este resultado na equação (3.44):

$$\dot{c}_1(t) = - \int_0^t \sum_k |g_k|^2 e^{i(\omega_0 - \omega_k)(t-t_1)} c_1(t_1) dt_1. \quad (3.47)$$

Podemos reescrever esta equação observando que:

$$\begin{aligned} \sum_k |g_k|^2 e^{i(\omega_0 - \omega_k)(t-t_1)} &= \text{Tr}_R \left(\hat{B}(t) \hat{B}^\dagger(t_1) \rho_R \right) e^{i\omega_0(t-t_1)} \\ &\equiv F(t - t_1), \end{aligned}$$

onde $\rho_R = |0\rangle_R \langle 0|$ é o estado de vácuo do reservatório. Neste caso,

$$\dot{c}_1(t) = - \int_0^t dt_1 F(t - t_1) c_1(t_1). \quad (3.48)$$

No limite do contínuo, a função de correlação $F(t - t_1)$ pode ser expressa em termos da densidade espectral do reservatório $f(\omega)$:

$$F(t - t_1) = \int d\omega f(\omega) e^{i(\omega_0 - \omega)(t-t_1)}. \quad (3.49)$$

O operador densidade $\rho(t)$ associado ao qubit é obtido através da equação (3.43) mediante o traço parcial com relação as variáveis do reservatório:

$$\rho(t) = \text{Tr}_R(|\phi(t)\rangle \langle \phi(t)|) = \begin{pmatrix} |c_1(t)|^2 & c_0^* c_1(t) \\ c_0 c_1^*(t) & 1 - |c_1(t)|^2 \end{pmatrix}. \quad (3.50)$$

Derivando esta equação com relação a t e usando $\dot{c}_0 = 0$:

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \begin{pmatrix} \frac{d}{dt}|c_1(t)|^2 & c_0^* \dot{c}_1(t) \\ c_0 \dot{c}_1^*(t) & -\frac{d}{dt}|c_1(t)|^2 \end{pmatrix}. \quad (3.51)$$

Podemos reescrever esta equação da seguinte maneira:

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\frac{i}{2}S(t) [\hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_-, \rho(t)] + \Gamma(t) \left(\hat{\sigma}_- \rho(t) \hat{\sigma}_+ - \frac{1}{2} \{ \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_-, \rho(t) \} \right) \quad (3.52)$$

com

$$S(t) = -2\text{Im} \left(\frac{\dot{c}_1(t)}{c_1(t)} \right), \quad (3.53)$$

$$\Gamma(t) = -2\text{Re} \left(\frac{\dot{c}_1(t)}{c_1(t)} \right), \quad (3.54)$$

onde $S(t)$ desempenha o papel do Lamb-Shift e $\Gamma(t)$ a taxa de decaimento do sistema, sendo que ambas quantidades dependem do tempo.

Portanto, para determinar a dinâmica do qubit é necessário resolver a equação (3.48). Para realizar esta tarefa, vamos adotar a seguinte densidade espectral:

$$f(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\gamma_0 \lambda^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \lambda^2}, \quad (3.55)$$

onde o parâmetro λ define a largura espectral em torno da frequência ω_0 , associada com o tempo de correlação do reservatório $\tau_R \propto 1/\lambda$. O parâmetro γ_0 está relacionado com o tempo de relaxação do qubit, $\tau_q \propto 1/\gamma_0$. Substituindo esta densidade espectral na equação (4.14) e resolvendo a integral [79]:

$$F(t - t_1) = \frac{1}{2} \gamma_0 \lambda e^{-\lambda(t-t_1)}, \quad (3.56)$$

com $t > t_1$. Usando este resultado e derivando a equação (3.48) com relação a t :

$$\begin{aligned} \ddot{c}_1(t) &= -\frac{1}{2} \gamma_0 \lambda \frac{d}{dt} \left(e^{-\lambda t} \int_0^t dt_1 e^{\lambda t_1} c_1(t_1) \right), \\ &= -\frac{1}{2} \gamma_0 \lambda \left(-\lambda e^{-\lambda t} \int_0^t dt_1 e^{\lambda t_1} c_1(t_1) + c_1(t) \right), \\ &= -\lambda \dot{c}_1 - \frac{1}{2} \gamma_0 \lambda c_1(t). \end{aligned}$$

Resolvendo esta equação diferencial de segunda ordem e aplicando a condição $\dot{c}_1(0) = 0$, consequência direta da equação (3.48), tem-se que:

$$c_1(t) = c_1(0)e^{-\lambda t/2} \left[\cosh\left(\frac{dt}{2}\right) + \frac{\lambda}{d} \sinh\left(\frac{dt}{2}\right) \right], \quad (3.57)$$

onde $d = \sqrt{\lambda^2 - 2\gamma_0\lambda}$. Substituindo este resultado nas equações (3.53) e (3.54) tem-se que $S(t) = 0$ e

$$\Gamma(t) = \frac{2\gamma_0\lambda \sinh(dt/2)}{d \cosh(dt/2) + \lambda \sinh(dt/2)}. \quad (3.58)$$

O regime markoviano é atingido quando a taxa de relaxação do qubit é muito maior que o tempo de correlação do reservatório, ou seja, $\tau_q \gg \tau_R$ (ou $\lambda \gg \gamma_0$). Neste caso,

$$d = \sqrt{\lambda^2 - 2\gamma_0\lambda} = \lambda\sqrt{1 - 2\gamma_0/\lambda} \approx \lambda,$$

logo

$$\Gamma(t) \approx \frac{2\gamma_0\lambda \sinh(\lambda t/2)}{\lambda \cosh(\lambda t/2) + \lambda \sinh(\lambda t/2)} \approx \frac{2\gamma_0}{1 + \frac{\cosh(\lambda t/2)}{\sinh(\lambda t/2)}},$$

implicando em $\Gamma(t) \approx \gamma_0$ para $\lambda \rightarrow \infty$. Com isso, mostra-se que neste limite, a equação (3.52) é equivalente a equação markoviana (3.15), com $N = 0$ e $\gamma_0 = 2\pi f(\omega_0)$.

A dinâmica do operador densidade que descreve o estado do qubit é obtida substituindo a equação (3.57) na equação (3.50):

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} \rho_{1,1}(0)P_t & \rho_{1,0}(0)\sqrt{P_t} \\ \rho_{0,1}(0)\sqrt{P_t} & \rho_{0,0}(0) + \rho_{1,1}(0)(1 - P_t) \end{pmatrix}, \quad (3.59)$$

com

$$P_t = e^{-\lambda t} \left[\cosh\left(\frac{dt}{2}\right) + \frac{\lambda}{d} \sinh\left(\frac{dt}{2}\right) \right]^2. \quad (3.60)$$

Para determinar a dinâmica de dois qubits idênticos não-interagentes acoplados a reservatórios independentes basta utilizar a equação (3.34), observando que os elementos do operador densidade (3.59) podem ser expressos da seguinte maneira:

$$\rho_{p,p'}(t) = \sum_{l,l'=0,1} \mathcal{M}_{pp',ll'}(t)\rho_{l,l'}(0), \quad (3.61)$$

onde $p, p' = 0, 1$ e

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{00,00}(t) &= 1 & , & & \mathcal{M}_{00,11}(t) &= 1 - P_t, \\ \mathcal{M}_{11,11}(t) &= P_t & , & & \mathcal{M}_{01,01}(t) &= \mathcal{M}_{10,10}(t) = \sqrt{P_t}. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Portanto, assumindo o estado inicial:

$$|\psi\rangle = \alpha |00\rangle + \sqrt{1 - \alpha^2} |11\rangle, \quad (3.63)$$

com $\alpha \in [0, 1]$, o operador densidade associado aos dois qubits é definido através das expressões abaixo:

$$\begin{aligned} \rho_{1,1}(t) &= (1 - \alpha^2)P_t^2, \\ \rho_{2,2}(t) &= \rho_{3,3}(t) = (1 - \alpha^2)P_t(1 - P_t), \\ \rho_{4,4}(t) &= \alpha^2 + (1 - \alpha^2)(1 - P_t)^2, \\ \rho_{1,4}(t) &= \rho_{4,1}(t) = \alpha\sqrt{1 - \alpha^2}P_t. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Na Figura (3.5) pode-se observar a dinâmica não-markoviana das correlações quânticas, referentes ao operador densidade (3.64), em função do tempo t para diferentes estados iniciais e para $\lambda = 0.01\gamma_0$. Neste caso, o emaranhamento entre os qubits foi calculado através do Emaranhamento de Formação (eq. (2.14)). Como discutido na Ref. [75], o comportamento do emaranhamento pode ser dividido em dois regimes, um quando $\alpha \geq 1/\sqrt{2}$ e outro quando $\alpha < 1/\sqrt{2}$. Para $\alpha \geq 1/\sqrt{2}$ o emaranhamento descreve uma oscilação amortecida anulando-se apenas para valores discretos de t , que coincidem com os zeros da função (3.60), ou seja, $t_n = 2[n\pi - \arctan(\tilde{d}/\lambda)]/\tilde{d}$ com $\tilde{d} = \sqrt{2\gamma_0\lambda - \lambda^2}$ [75]. Este comportamento é ilustrado⁴ na Fig. (3.5c) onde usamos $\alpha = 1/\sqrt{2}$. Note também que neste caso, o emaranhamento não apresenta uma dependência temporal monotônica, característica da dinâmica markoviana.

Para $\alpha < 1/\sqrt{2}$ existem também dois regimes de parâmetros que caracterizam o comportamento do emaranhamento. Para alguns valores de α o emaranhamento pode sofrer uma morte súbita como no caso markoviano, por exemplo para $\alpha = 1/\sqrt{10}$ (veja Fig. (3.5a)). Em outros casos, o emaranhamento

⁴Os valores do Emaranhamento de Formação nas vizinhanças de t_n são muito próximos de zero (mas sempre positivos), dificultando a visualização deste comportamento.

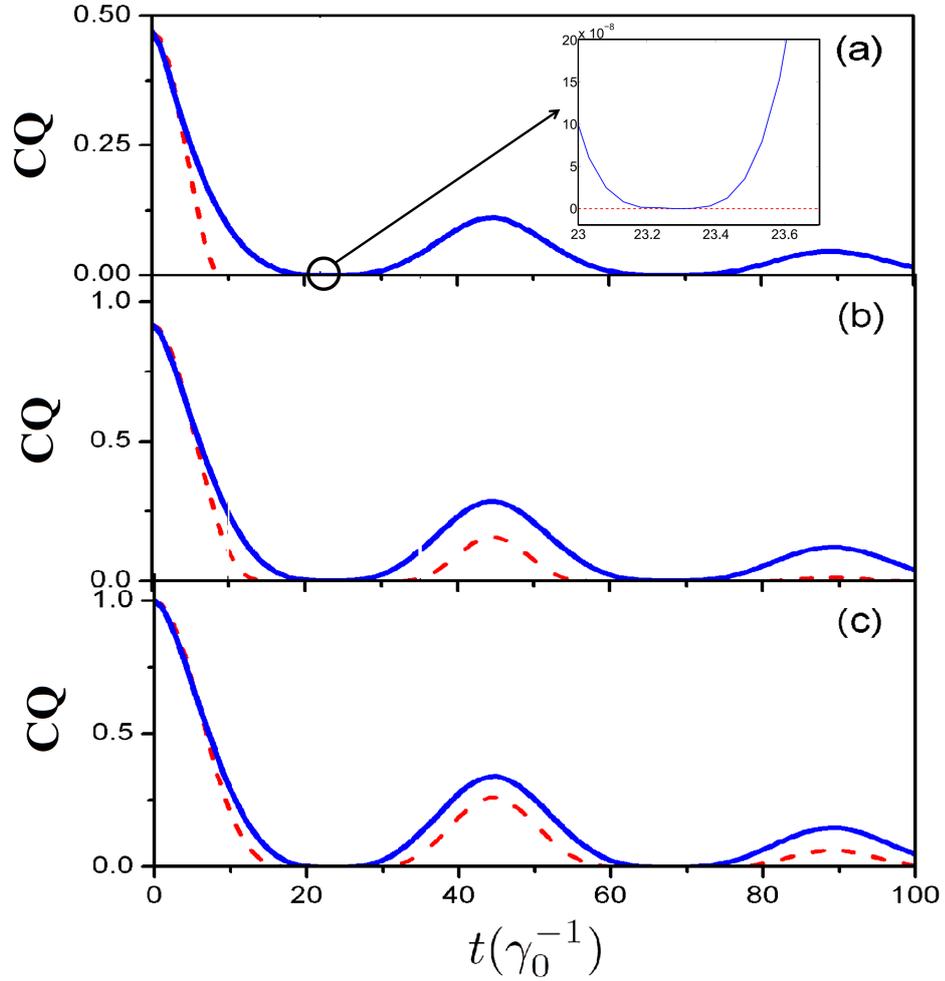


FIGURA 3.5: Dinâmica das correlações quânticas entre dois qubits não-interagentes acoplados a reservatórios não-markovianos independentes para diferentes estados iniciais [determinados pela eq. (3.63)]: (a) $\alpha = 1/\sqrt{10}$, (b) $\alpha = 1/\sqrt{3}$ e (c) $\alpha = 1/\sqrt{2}$. A Discórdia Quântica é caracterizada pela linha sólida/azul e o Emaranhamento de Formação pela linha tracejada/vermelha. Para gerar estes resultados adotamos $\lambda = 0.01\gamma_0$. O gráfico inserido no painel (a) representa um *zoom* em torno do ponto $t_1 \approx 23.27$.

exibe um novo fenômeno, conhecido como *nascimento súbito do emaranhamento* [76; 77]: o emaranhamento entre os qubits desaparece subitamente e ressurgue após um intervalo de tempo finito, como ilustrado na Fig. (3.5b), onde utilizou-se $\alpha = 1/\sqrt{3}$. Este ressurgimento é uma consequência da memória do reservatório, devido a sua natureza não-markoviana, pois não há qualquer interação entre os qubits. Diferente do caso markoviano, a informação e energia transferida do sistema para o reservatório pode eventualmente retornar ao sistema [13].

A Discórdia Quântica, por outro lado, não sofre um desaparecimento súbito, anulando-se apenas para valores discretos de t , determinados pela relação $t_n = 2[n\pi - \arctan(\tilde{d}/\lambda)]/\tilde{d}$, quando o estado dos qubits torna-se puro e separável. Este comportamento, apresentado na Fig. 3.5, acontece para qualquer estado inicial com α entre 0 e 1, ou seja, para estados iniciais quanticamente correlacionados. No entanto, nas regiões onde não há emaranhamento a Discórdia assume valores muito próximos de zero, como ilustrado no gráfico inserido na Fig. (3.5)a. Além disso, como constatado na Fig. (3.5), a Discórdia apresenta qualitativamente o mesmo comportamento para os distintos valores de α .

3.2.2 Reservatório Coletivo

Nosso próximo passo é estudar a dinâmica das correlações quânticas quando dois qubits idênticos estão acoplados ao mesmo reservatório térmico. Neste caso, o Hamiltoniano que descreve o sistema é dado por:

$$\hat{H} = \omega_0 \sum_{i=1}^2 \hat{\sigma}_+^i \hat{\sigma}_-^i + \sum_k \omega_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + (\hat{\sigma}_+^1 + \hat{\sigma}_+^2) \otimes \hat{B} + (\hat{\sigma}_-^1 + \hat{\sigma}_-^2) \otimes \hat{B}^\dagger, \quad (3.65)$$

com $\hat{B} = \sum_k g_k \hat{b}_k$. Este Hamiltoniano pode ser reescrito na base:

$$|0\rangle = |00\rangle, \quad |+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|10\rangle + |01\rangle), \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|10\rangle - |01\rangle), \quad |2\rangle = |11\rangle,$$

assumindo a forma:

$$\hat{H} = 2\omega_0 |2\rangle \langle 2| + \omega_0 (|+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -|) + \sum_k \omega_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \hat{H}_{SR}, \quad (3.66)$$

onde

$$\hat{H}_{SR} = \sum_k \sqrt{2} g_k \hat{b}_k (|+\rangle \langle 0| + |2\rangle \langle +|) + h.c., \quad (3.67)$$

com *h.c.* denotando o hermitiano conjugado. As equações (3.66) e (3.67) mostram que a interação com o reservatório induz as transições $|+\rangle \longleftrightarrow |0\rangle$ e $|+\rangle \longleftrightarrow |2\rangle$, enquanto que o estado $|-\rangle$ não é afetado pelo reservatório. Portanto, a dinâmica do sistema é constituída de duas partes: 1) a dinâmica livre do estado $|-\rangle$ e 2) a dinâmica de um sistema de três níveis $\{|0\rangle, |+\rangle, |2\rangle\}$ na configuração *escada*, representada na Figura (3.6).

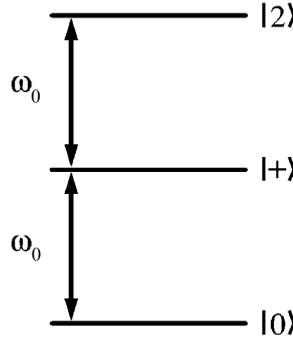


FIGURA 3.6: Sistema de três níveis na configuração escada. As transições $|+\rangle \longleftrightarrow |0\rangle$ e $|+\rangle \longleftrightarrow |2\rangle$ possuem a mesma frequência de transição ω_0 .

Se a densidade espectral associada ao reservatório térmico é definida pela equação (3.55), a dinâmica do sistema, oriunda do Hamiltoniano (3.66), pode ser obtida através da seguinte equação mestra⁵ (na representação de interação) [78]:

$$\frac{d}{dt}\rho = -i[\hat{V}, \rho] + \lambda(2\hat{a}\rho\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}\rho - \rho\hat{a}^\dagger\hat{a}), \quad (3.68)$$

com

$$\hat{V} = \sqrt{\gamma_0\lambda} (\hat{a}|+\rangle\langle 0| + \hat{a}|2\rangle\langle +| + \hat{a}^\dagger|0\rangle\langle +| + \hat{a}^\dagger|+\rangle\langle 2|), \quad (3.69)$$

onde os operadores de aniquilação e criação, \hat{a} e \hat{a}^\dagger , estão associados a um *pseudo-modo* definido a partir das propriedades da densidade espectral do reservatório, equação (3.55), como demonstrado nas Refs. [79–81]. O operador densidade ρ representa o estado do sistema formado pelo pseudo-modo bosônico e pelos dois qubits. Logo, a dinâmica dos dois qubits é obtida através de ρ mediante o traço parcial com relação ao pseudo-modo. A solução da equação (3.68) é obtida numericamente assumindo que os dois qubits encontram-se inicialmente no estado

⁵Neste caso, esta equação mestra corresponde à dinâmica exata do sistema, ou seja, as aproximações de Born e Markov não foram utilizadas na sua dedução.

(3.63) e que o estado inicial do pseudo-modo é o estado de vácuo (correspondendo ao caso $T = 0K$). Com isso, foi possível calcular tanto o Emaranhamento de Formação quanto a Discórdia Quântica em função do estado inicial, definido pelo parâmetro α , e do grau de não-markovianidade do reservatório, λ . Como no caso anterior, o comportamento markoviano torna-se mais evidente para $\lambda \gg \gamma_0$ [78].

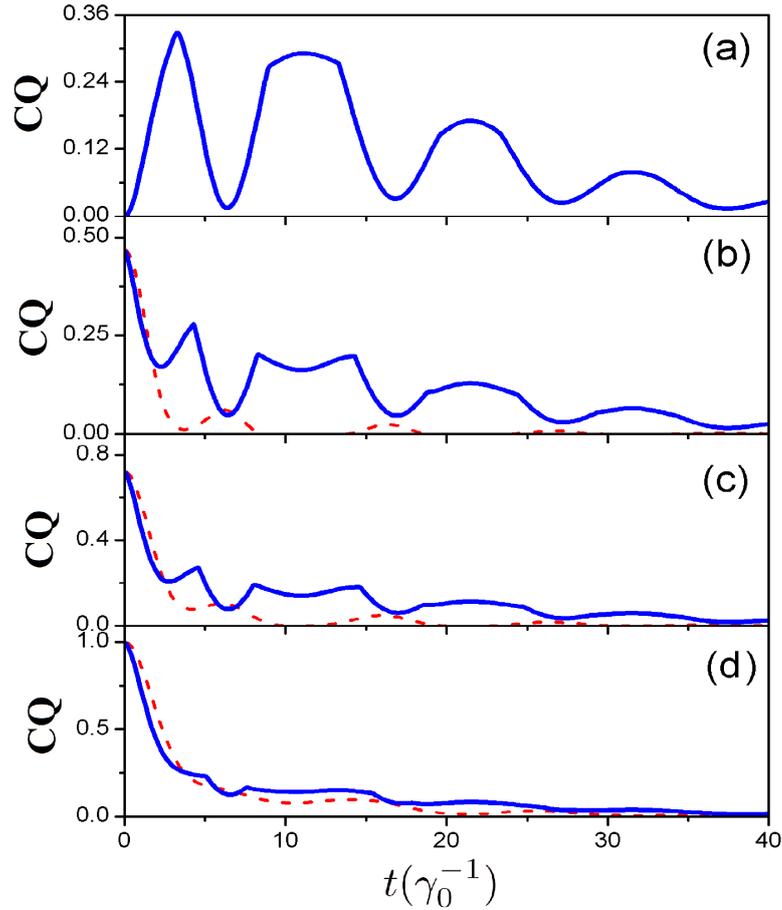


FIGURA 3.7: Dinâmica das correlações quânticas (CQ) entre dois qubits não-interagentes acoplados ao mesmo reservatório térmico (com $T = 0K$) em função do tempo t , para $\lambda = 0.1\gamma_0$ e para: (a) $\alpha = 0$, (b) $\alpha = 1/\sqrt{10}$, (c) $\alpha = 1/\sqrt{5}$ e (d) $\alpha = 1/\sqrt{2}$. A Discórdia Quântica é caracterizada pela linha sólida/azul e o Emaranhamento de Formação pela linha tracejada/vermelha.

O comportamento dinâmico do Emaranhamento de Formação e da Discórdia Quântica em função do tempo para $\lambda = 0.1\gamma_0$ e diferentes estados iniciais é apresentado na Figura (3.7). A dinâmica do emaranhamento pode ser separada em dois regimes [78]: para $\alpha^2 \gtrsim 1/4$ observa-se oscilações amortecidas (veja Fig.

(3.7d), linha tracejada), e para $\alpha^2 \lesssim 1/4$ nota-se que o emaranhamento desaparece durante um intervalo de tempo finito, ressurgindo num momento posterior, como mostrado nas Figs. (3.7b) e (3.7c). Este comportamento se repete algumas vezes até o sistema atingir o regime estacionário, quando o emaranhamento desaparece completamente.

Embora no caso de reservatório independentes o comportamento da Discórdia Quântica é qualitativamente o mesmo para diferentes valores de α (veja Figura (3.5)), o acoplamento com o mesmo reservatório faz com que a dinâmica da Discórdia entre os dois qubits seja fortemente afetada pelo estado inicial, como mostrado na Figura (3.7). Para $\alpha = 1/\sqrt{2}$ a Discórdia e o Emaranhamento de Formação apresentam um comportamento semelhante mas, conforme o valor de α diminui, a Discórdia começa a exibir um comportamento oscilatório mais complicado, apresentado inclusive alguns *bicos*. Nestes pontos especiais, a primeira derivada da Discórdia com relação a t é descontínua e, como discutido na Ref. [82], caracterizam os pontos onde os projetores que minimizam a entropia condicional quântica (2.30) são alterados⁶. Tal comportamento é denominado *mudança súbita* e foi observado experimentalmente, por exemplo, por R. Auccaise *et al* [83].

A diferença entre a Discórdia e o EoF é mais drástica para $\alpha = 0$, quando o estado inicial é o estado separável $|11\rangle$ (veja Fig. (3.7a)). Neste caso, embora a interação entre os qubits induzida pelo acoplamento com o mesmo reservatório não seja suficiente para emaranhar os dois qubits, ainda assim é possível gerar correlações quânticas entre eles. Por outro lado, para $\alpha = 1$, nenhuma correlação quântica é criada, tendo em vista que o sistema global encontra-se inicialmente no estado fundamental, com os qubits no estado $|00\rangle$ e o reservatório no estado de vácuo. Note também que em algumas regiões enquanto o emaranhamento diminui a Discórdia aumenta.

Na Figura (3.8) apresentamos o comportamento da Discórdia Quântica e do EoF em função do tempo para diferentes graus de não-markovianidade: (a) $\lambda = 0.1\gamma_0$, (b) $\lambda = \gamma_0$ e (c) $\lambda = 10\gamma_0$. O estado inicial utilizado corresponde a equação (3.63) com $\alpha = 1/\sqrt{3}$. Como observado na Figura (3.8c), o emaranhamento exibe

⁶Entre dois “bicos” consecutivos a entropia condicional quântica (2.30) é minimizada pelo mesmo conjunto de projetores.

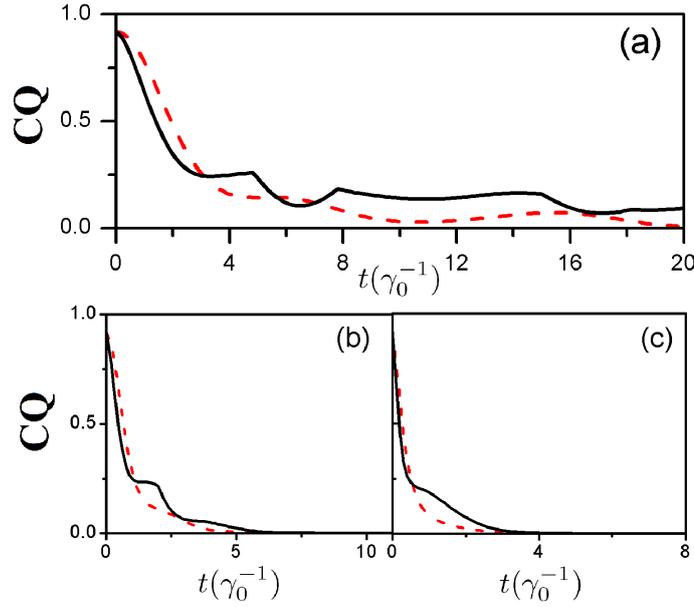


FIGURA 3.8: Dinâmica das correlações quânticas (CQ) entre dois qubits não-interagentes acoplados ao mesmo reservatório térmico (com $T = 0K$) em função do tempo t , para (a) $\lambda = 0.1\gamma_0$, (b) $\lambda = \gamma_0$ e (c) $\lambda = 10\gamma_0$. O estado inicial utilizado é dado pela equação (3.63) com $\alpha = 1/\sqrt{3}$. A Discórdia Quântica é caracterizada pela linha sólida/preta e o Emaranhamento de Formação pela linha tracejada/vermelha.

um decaimento praticamente exponencial para $\lambda = 10\gamma_0$. Este comportamento é esperado pois para $\lambda \gg \gamma_0$ o acoplamento com o reservatório torna-se fraco, evidenciando o seu caráter markoviano. Neste regime, a Discórdia apresenta características similares e conforme o valor de λ aumenta os pontos onde ocorrem as mudanças súbitas começam a desaparecer. Além disso, como a interação efetiva entre os qubits é devido ao acoplamento com o reservatório coletivo, as correlações quânticas tendem a zero mais rapidamente a medida que o regime de acoplamento fraco faz-se presente.

3.3 Considerações Finais

Os resultados apresentados neste Capítulo mostram que a Discórdia Quântica é mais robusta à morte súbita, mesmo quando os qubits estão acoplados a reservatórios térmicos independentes com temperaturas finitas. Esta resistência sugere que os protocolos de Computação e Informação Quântica baseados em

correlações quânticas de estados separáveis são mais robustos com relação às perturbações externas. Os resultados referentes a seção 3.1 foram publicados em agosto de 2009 no periódico *Physical Review A* e constituem o primeiro estudo sobre a dinâmica da Discórdia Quântica no contexto de sistemas quânticos abertos⁷. Diversos trabalhos posteriores comprovaram esta resistência da Discórdia aos efeitos do meio-ambiente como, por exemplo, a Ref. [84], onde foi demonstrado que a ação de reservatórios markovianos não acarreta na morte súbita da Discórdia. Embora não exista uma prova geral, os resultados da seção 3.2 indicam que mesmo no caso de reservatórios não-markovianos a Discórdia não desaparece completamente durante um intervalo de tempo finito. Embora a Discórdia seja nula apenas quando para alguns valores específicos de t ou para $t \rightarrow \infty$, ela pode atingir valores muito baixos para tempos finitos. Portanto, futuras aplicações destas correlações quânticas podem exigir um certo valor mínimo de Discórdia e não apenas a sua existência.

⁷T. Werlang, S. Souza, F. F. Fanchini, and C. J. Villas Boas. *Physical Review A* **80**, 024103 (2009).

Capítulo 4

Transições de Fase Quânticas

4.1 Aspectos Básicos das Transições de Fase

A fase de um sistema Termodinâmico é qualquer porção homogênea deste, ou seja, quando as propriedades macroscópicas observadas são idênticas. A água, por exemplo, pode exibir três fases distintas em condições normais: sólida, líquida e gasosa. A passagem de uma fase a outra ocorre conforme os parâmetros externos, como a pressão P e a temperatura T , são alterados. No caso da água, é possível observar uma transição da fase sólida (que possui simetria discreta, definida pela simetria da rede cristalina) para a fase gasosa (invariante por translações arbitrárias) com o aumento da temperatura. Do ponto de vista microscópico, esse aumento da temperatura gera um aumento da agitação térmica das moléculas da água que, em um dado momento, destroem a estrutura cristalina. Dessa forma, a ordem de longo alcance é destruída pelas flutuações térmicas. Essa transição apresenta uma coexistências de fases, a temperatura e a pressão permanecem constantes enquanto que toda energia envolvida no processo, chamada de calor latente, é usada para converter uma fase em outra. As transições que envolvem calor latente são denominadas de transições de primeira ordem. Por outro lado, uma transição de fase pode correr de forma suave sem que duas ou mais fases coexistam. Tais transições, que não envolvem calor latente, são denominadas de transições de segunda ordem ou contínuas. O ponto que separa as duas fases neste caso recebe o nome de *ponto crítico*. Um exemplo típico desse tipo de

transição acontece com o ferro. Para baixas temperaturas existe um ordem de longo alcance entre os spins dos elétrons, caracterizando uma fase ferromagnética, enquanto que para altas temperaturas o ferro torna-se paramagnético. No caso da transição contínua entre as fases ferromagnética e paramagnética existe uma grandeza termodinâmica que caracteriza as duas fases, a magnetização. Na fase ferromagnética (fase ordenada) existe uma magnetização diferente de zero mas, conforme a temperatura aumenta, a magnetização diminui, anulando-se na fase paramagnética (fase desordenada) para temperaturas maiores que a temperatura crítica T_c (a temperatura de Curie).

A grandeza termodinâmica com a propriedade de ser nula na fase desordenada e finita na fase ordenada é denominada parâmetro de ordem. Este conceito foi introduzido por Landau na sua teoria fenomenológica das transições de fase. Com o intuito de ilustrar algumas das ideias da teoria de Landau vamos continuar examinando a transição magnética. Inicialmente, assume-se que a energia livre de Gibbs G é função apenas de P , T e do parâmetro de ordem¹ ζ . Como no equilíbrio a energia livre de Gibbs é determinada por P e T tem-se que $\zeta = \zeta(P, T)$. A primeira consideração de Landau consiste em assumir que a energia livre de Gibbs pode ser expandida em potências do parâmetro de ordem² ζ :

$$G(T, P, \zeta) = G_0(T, P) + \alpha_1\zeta + \alpha_2\zeta^2 + \alpha_3\zeta^3 + \alpha_4\zeta^4 + \dots \quad (4.1)$$

A segunda condição é a que minimiza G , ou seja

$$\left. \frac{\partial G}{\partial \zeta} \right|_{\zeta=0} = 0 \quad \text{e} \quad \left. \frac{\partial^2 G}{\partial \zeta^2} \right|_{\zeta=0} > 0. \quad (4.2)$$

Para a condição $\left. \frac{\partial G}{\partial \zeta} \right|_{\zeta=0} = 0$ ser satisfeita deve-se ter $\alpha_1 = 0$. Um valor finito para α_3 leva a uma transição de fase de primeira ordem e uma descontinuidade em ζ , enquanto que $\alpha_3 = 0$ caracteriza uma transição contínua³. Desprezando os termos de ordens superiores (e assumindo $\alpha_3 = 0$), a energia livre assume a forma:

$$G(T, P, \zeta) = G_0(T, P) + \alpha_2\zeta^2 + \alpha_4\zeta^4, \quad (4.3)$$

¹Lembrando que na fase ordenada ($T < T_c$) tem-se $\zeta > 0$ enquanto que na fase desordenada ($T > T_c$) $\zeta = 0$.

²No caso de uma transição de segunda ordem esta hipótese parece razoável, pois ζ tende a zero de maneira contínua nas vizinhanças do ponto crítico.

³Na transição magnética $\zeta = M$ é um vetor ($\zeta^2 = \vec{\zeta} \cdot \vec{\zeta}$), logo $\alpha_3 = 0$ pois não é possível formar um escalar a partir de ζ^3 .

onde $\alpha_4 > 0$ para garantir a existência do equilíbrio. A energia livre de Gibbs para um sistema magnético onde as variações de volume são desprezadas é $G(T, H, M) = F(T, M)$, onde $F(T, M)$ é a energia livre de Helmholtz e M a magnetização. Portanto:

$$G(T, H, M) = F_0(T) + \alpha_2(T)M^2 + \alpha_4(T)M^4. \quad (4.4)$$

Aplicando a condição de minimização (4.2):

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial \zeta} &= 2\alpha_2(T)M + 4\alpha_4(T)M^3 = 0, \\ \frac{\partial^2 G}{\partial \zeta^2} &= 2\alpha_2(T) + 12\alpha_4(T)M^2 > 0. \end{aligned}$$

A primeira equação é satisfeita para $M = 0$ ou $M^2 = -\alpha_2/2\alpha_4$. Agora, usando a segunda equação nota-se que:

$$M = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha_2 > 0 \quad \text{e} \quad M^2 = -\frac{\alpha_2}{2\alpha_4} \quad \Rightarrow \quad \alpha_2 < 0.$$

Portanto, para $\alpha_2 > 0$ o único mínimo da eq. (4.3) é $M = 0$ enquanto que para $\alpha_2 < 0$ existem dois mínimos. Para garantir a continuidade de α_2 é necessário que $\alpha_2(T_c) = 0$. A forma mais simples que satisfaz tal condição é $\alpha_2(T_c) = a(T - T_c)$. Com isso, as duas soluções para o parâmetro de ordem são:

$$\begin{aligned} M &= 0 & , & \quad T > T_c \\ M &= \pm \sqrt{\frac{a(T_c - T)}{2\alpha_4}} & , & \quad T < T_c. \end{aligned}$$

Note que a magnetização se anula segundo uma lei de potência $M \propto (T_c - T)^{\frac{1}{2}}$. O expoente $1/2$ é conhecido como expoente crítico e desempenha um papel importante no estudo de transições de fase. Além do parâmetro de ordem, outras grandezas físicas, tais como o calor específico e a susceptibilidade magnética, apresentam também um comportamento descrito por expoentes críticos. De uma maneira geral, na vizinhança do ponto crítico todas as funções termodinâmicas podem ser expressas como [85]:

$$f(t) = At^\lambda(1 + Bt^x + \dots)$$

onde A, B, λ e x são constantes com $x > 0$ e $t = (T_c - T)/T_c$ é a distância ao ponto crítico T_c (definida dessa forma apenas se $T_c \neq 0$). O expoente λ é o expoente

crítico associado a f cuja definição é:

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln f(t)}{\ln(t)}.$$

Os expoentes críticos possuem um caráter universal, ou seja, são os mesmos para distintos materiais e mesmo para distintos sistemas físicos. Por exemplo, o expoente crítico do parâmetro de ordem da transição líquido-gás de segunda ordem⁴ é o mesmo da transição ferromagnética para sistemas com simetria Ising⁵. Entretanto, os valores dos expoentes críticos preditos pela teoria de Landau geralmente não correspondem àqueles obtidos experimentalmente. Essa discrepância surge pois a teoria de Landau não leva em conta as flutuações do parâmetro de ordem⁶. Embora o valor médio de ζ seja zero na fase desordenada, as suas flutuações não são necessariamente zero. Portanto, segundo o critério de Ginzburg, a teoria de Landau é satisfatória desde que as flutuações do parâmetro de ordem com relação ao seu valor médio sejam pequenas.

Na próxima seção o famoso modelo de Ising é introduzido. Este modelo foi proposto por Lenz e resolvido por Ising, seu aluno, em uma dimensão e por Onsager, em duas dimensões [85]. Com este modelo busca-se ilustrar alguns aspectos importantes da teoria de transição de fase.

4.2 Cadeias de Spins

Os fenômenos magnéticos despertam a curiosidade do homem desde os primórdios da Humanidade⁷. Embora o magnetismo venha sendo estudado ao longo de vários séculos, sua origem ainda não é completamente entendida. No caso dos materiais isolantes (ou semicondutores), o alinhamento dos momentos

⁴Neste caso o parâmetro de ordem é a diferença entre as densidades de líquido e gás.

⁵Os expoentes críticos dependem de poucos parâmetros. Se as interações forem de curto alcance os expoentes serão determinados pela dimensionalidade do espaço e pela simetria do parâmetro de ordem.

⁶Tal discrepância entre teoria e experimento foi entendida na década de 1970 com o surgimento da teoria do grupo de renormalização. Uma discussão a respeito do grupo de renormalização está fora do escopo dessa tese.

⁷Os primeiros relatos de experimentos envolvendo o magnetismo datam de 800 a.c. e são atribuídos aos gregos. Segundo uma lenda, o termo *magnetismo* tem como origem o nome de um pastor de ovelhas, Magnes. Ele teria observado a ponta de ferro de seu cajado ser atraída por uma certa pedra, a magnetita.

magnéticos dos elétrons localizados próximos aos sítios da rede cristalina é responsável pelos efeitos magnéticos. Entretanto, no caso dos metais, a tarefa de estudar a origem do magnetismo é mais complexa, pois é necessário levar em conta os efeitos dos momentos magnéticos associados aos elétrons de condução.

Para sistemas com elétrons localizados pode-se descrever o magnetismo a partir de Hamiltonianos de spins [86; 87]. Um dos modelos mais importantes a incorporar tal descrição é o modelo de Heisenberg [86; 87]:

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \hat{\sigma}_i \cdot \hat{\sigma}_j \quad \hat{\sigma}_i = (\hat{\sigma}_i^x, \hat{\sigma}_i^y, \hat{\sigma}_i^z), \quad (4.5)$$

onde J_{ij} é a constante de troca que descreve a interação entre os spins i e j e $\hat{\sigma}_i^k$ ($k = x, y, z$) são as matrizes de Pauli atuando sobre o i -ésimo spin. Se $J_{ij} > 0$ a interação favorece elétrons com spins paralelos, resultando no ferromagnetismo. O anti-ferromagnetismo é obtido para $J_{ij} < 0$, onde uma configuração formada por elétrons com spins anti-paralelos é favorecida. O modelo de Heisenberg pode ser obtido como um limite do modelo de Hubbard⁸ [86; 87]. Em algumas situações, devido a interação spin-órbita o sistema pode apresentar uma direção preferencial⁹. Denotando tal direção por z o modelo de Heisenberg simplifica-se da seguinte forma:

$$H_I = - \sum_{i,j} J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z, \quad (4.6)$$

conhecido como modelo de Ising. A versão bidimensional deste modelo apresenta uma transição de fase: para $T < T_c$ o sistema apresenta uma magnetização espontânea $M = \sum_i \langle \hat{\sigma}_i^z \rangle$, enquanto que para $T > T_c$ as flutuações tendem a destruir o alinhamento dos spins, implicando em $M = 0$. No entanto, existe um ponto que deve ser mencionado. O Hamiltoniano (4.6) é invariante em relação à operação $\hat{\sigma}_i^z \rightarrow -\hat{\sigma}_i^z$, portanto $\langle \hat{\sigma}_i^z \rangle = -\langle \hat{\sigma}_i^z \rangle$, ou seja, $\langle \hat{\sigma}_i^z \rangle = 0$. Logo, não deveríamos observar uma magnetização finita. Porém, o que ocorre aqui é uma *quebra espontânea de simetria* [88], em outras palavras, devido a alguma perturbação (um campo externo, por exemplo) o estado termodinâmico do sistema para $T < T_c$ “colapsa” num estado que não apresenta a simetria do

⁸Este é o modelo mais simples para elétrons interagentes em um sólido cristalino.

⁹Isso ocorre, por exemplo, com os compostos YFeO₃, CrBr₃ e LiHoF₄.

Hamiltoniano, permanecendo neste estado mesmo após o desaparecimento desta perturbação, dando origem à magnetização¹⁰. Outros dois importantes modelos¹¹ derivados do Hamiltoniano (4.5) são o modelo XY, cujo Hamiltoniano é dado por:

$$H_{xy} = - \sum_{i,j} J_{ij}^x \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_j^x + J_{ij}^y \hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_j^y, \quad (4.7)$$

e o modelo XXZ, descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H_{xxz} = - \sum_{i,j} J_{ij} \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_j^x + J_{ij} \hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_j^y + J_{ij}^z \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z. \quad (4.8)$$

No que segue considera-se um sistema unidimensional de N spins- $\frac{1}{2}$ sujeito a condições de contorno periódicas ($\hat{\sigma}_{N+1}^z = \hat{\sigma}_1^z$) com interações apenas entre os primeiros vizinhos ($j = i + 1$). A solução encontrada por Ising refere-se à versão clássica do Hamiltoniano (4.6), a qual é obtida impondo que $\hat{\sigma}_i^z = \sigma_i^z = \pm 1$. Além disso, cada spin é submetido à ação de um campo magnético h na direção z . Neste momento vamos nos restringir ao caso $J_{ij} = J$. Para calcular as propriedades físicas de interesse é necessário inicialmente determinar a função de partição $Z = \sum_{\{\sigma_i^z = \pm 1\}} \exp(-\beta H_I)$, onde $\beta = 1/kT$ é definido em termos da temperatura T e da constante de Boltzmann k . A expressão para H_I é dada por:

$$H_I = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - h \sum_{i=1}^N \sigma_i^z. \quad (4.9)$$

A função de partição é portanto

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma_i^z = \pm 1} \exp \left(J\beta \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + h\beta \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \right) \\ &= \sum_{\sigma_i^z = \pm 1} \prod_{i=1}^N \exp \left(J\beta \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + \frac{h\beta}{2} [\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z] \right) \\ &= \sum_{\sigma_i^z = \pm 1} M_{\sigma_1^z, \sigma_2^z} M_{\sigma_2^z, \sigma_3^z} \dots M_{\sigma_N^z, \sigma_1^z}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

onde

$$M_{\sigma_i^z, \sigma_{i+1}^z} = \exp \left(J\beta \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + \frac{h\beta}{2} [\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z] \right)$$

¹⁰Para maiores detalhes, consulte a Ref. [88].

¹¹Estes modelos serão analisados com mais cuidado no próximo Capítulo.

pode ser tratada como a matriz:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} M_{+1,+1} & M_{+1,-1} \\ M_{-1,+1} & M_{-1,-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(J\beta + h\beta) & \exp(-J\beta) \\ \exp(-J\beta) & \exp(J\beta - h\beta) \end{pmatrix}, \quad (4.11)$$

conhecida como *matriz de transferência*. Agora, se \mathbf{A} , \mathbf{B} , e \mathbf{C} são matrizes e $\mathbf{A} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{C}$ então $A_{ik} = \sum_j B_{ij} C_{jk}$. Aplicando essa propriedade na equação (4.10) e escrevendo \mathbf{M} na forma diagonal $D = \mathbf{U} \mathbf{A} \mathbf{U}^{-1}$, a função de partição passa a ser dada por:

$$Z = \sum_{\sigma_i^z = \pm 1} M(\sigma_1^z, \sigma_1^z)^N = \text{Tr}(M)^N = \text{Tr}(U^{-1} D U)^N = \text{Tr}(D)^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (4.12)$$

onde λ_1 e λ_2 são os autovalores da matriz de transferência:

$$\lambda_{1,2} = e^{J\beta} \cosh(h\beta) \pm \sqrt{e^{2J\beta} \sinh^2(h\beta) + e^{-2J\beta}}. \quad (4.13)$$

Procedendo de forma análoga, a função de correlação G_{ij} entre dois spins i e j ($i \leq j$) é obtida da seguinte forma¹² (para o caso $h = 0$):

$$\begin{aligned} G_{ij} &= \langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle - \langle \sigma_i^z \rangle \langle \sigma_j^z \rangle = \langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_i^z = \pm 1} \exp(-\beta H_I) \sigma_i^z \sigma_j^z \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_i^z = \pm 1} M_{\sigma_1^z, \sigma_2^z} \dots M_{\sigma_{i-1}^z, \sigma_i^z} M_{\sigma_i^z, \sigma_{i+1}^z} \sigma_i^z \dots M_{\sigma_{j-1}^z, \sigma_j^z} M_{\sigma_j^z, \sigma_{j+1}^z} \sigma_j^z \dots M_{\sigma_N^z, \sigma_1^z} \\ &= \frac{1}{Z} \text{Tr} (M^i \hat{\sigma}^z M^{j-i} \hat{\sigma}^z M^{N-j}), \end{aligned}$$

onde $\hat{\sigma}^z$ é uma matriz de Pauli. O traço pode ser calculado usando a base que diagonaliza M . Tal base é formada pelos autovetores $|1\rangle = \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$ e $|2\rangle = \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$ associados aos autovalores $\lambda_1 = 2 \cosh(J\beta)$ e $\lambda_2 = 2 \sinh(J\beta)$, respectivamente. Agora, usando a eq. (4.12) e as relações $\langle 1 | \sigma^z | 1 \rangle = \langle 2 | \sigma^z | 2 \rangle = 0$ e $\langle 1 | \sigma^z | 2 \rangle = \langle 2 | \sigma^z | 1 \rangle = 1$:

$$\langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle = \frac{\lambda_1^{N-j+1} \lambda_2^{j-i} + \lambda_2^{N-j+1} \lambda_1^{j-i}}{\lambda_1^N + \lambda_2^N}.$$

No limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) a função de correlação assume a seguinte forma:

$$\langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle = (\tanh(J\beta))^{j-i}. \quad (4.14)$$

¹²Neste caso é importante observar que se \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} , e \mathbf{D} são matrizes e $\mathbf{A} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{C}$ onde \mathbf{D} é diagonal então $A_{ik} = \sum_j B_{ij} C_{jk} D_{jj}$.

Note que a função de correlação depende apenas da distância entre os spins i e j . Se os spins estiverem em uma rede cuja distância entre os sítios vizinhos é a pode-se então reescrever a eq. (4.14) usando $\sigma^z(\tau) \equiv \sigma_j^z$ com $\tau = ja$:

$$\langle \sigma^z(\tau) \sigma^z(0) \rangle = e^{-|\tau|/\xi}, \quad (4.15)$$

onde o *comprimento de correlação* ξ é dado por

$$\frac{1}{\xi} = \frac{1}{a} \ln \coth(J\beta). \quad (4.16)$$

O comprimento de correlação nos diz que dois spins estarão descorrelacionados se eles estiverem separados por uma distância muito maior que ξ . É importante lembrar que as eqs. (4.15) e (4.16) são válidas para $h = 0$, sendo estas expressões alteradas na presença do campo externo h . Quando o comprimento do sistema, definido como $L_\tau \equiv Na$, for muito menor que ξ , o sistema como um todo pode ser afetado por uma pequena flutuação. Esse comportamento é semelhante ao obtido nas vizinhanças de um ponto crítico, mesmo o sistema sendo finito. A eq. (4.16) mostra que tal situação é atingida, por exemplo, no limite de baixas temperaturas, desde que $\ln \coth(J\beta) \rightarrow 0$ para $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$), ou seja, $\xi \rightarrow \infty$. Por outro lado, uma flutuação teria seu efeito limitado a uma dada região para $L_\tau \gg \xi$. Estes resultados serão utilizados na próxima seção.

4.3 Transições de Fase Quânticas

Até o momento falamos de transições de fase a temperatura finita. Segundo S. Sachdev [89], a Mecânica Quântica não desempenha nenhum papel na descrição de tais transições, embora ela possa ser importante na descrição das distintas fases do sistema físico em questão¹³. Uma possível justificativa para tal afirmação baseia-se no fato de que nas transições de segunda ordem, o comprimento de correlação diverge na vizinhança do ponto crítico, com tal divergência obedecendo a seguinte relação:

$$\xi \sim |t|^{-\nu},$$

¹³Por exemplo, para explicar a fase supercondutora.

onde ν é um expoente crítico. Dessa forma, as escalas de comprimento que determinam o comportamento termodinâmico são muito maiores que as escalas microscópicas onde os efeitos quânticos são relevantes. Já no caso das transições de primeira ordem, como o comprimento de correlação é finito, pode acontecer da Mecânica Quântica desempenhar algum papel, embora não se conheça uma situação onde isso realmente ocorra (veja a seção 2.14.2 da Ref. [90]). Uma maneira mais adequada de abordar essa questão consiste em comparar a energia associada as flutuações térmicas, kT , e a energia associada as flutuações quânticas, $\hbar\omega_c$, cuja origem é frequentemente atribuída ao *princípio de Incerteza de Heisenberg*. A frequência ω_c está associada ao comprimento de correlação temporal τ_c , que descreve o comportamento temporal das flutuações do parâmetro de ordem. O comprimento τ_c também é chamado de *tempo de equilibração*, o tempo necessário para o sistema retornar ao estado de equilíbrio após sofrer uma perturbação. Portanto, o comportamento crítico será influenciado pela Mecânica Quântica se a seguinte condição for satisfeita:

$$\hbar\omega_c \gg kT. \quad (4.17)$$

Como nas transições contínuas o tempo de equilibração diverge conforme se aproxima do ponto crítico:

$$\tau_c \sim \xi^z \sim |t|^{-z\nu}, \quad (4.18)$$

onde z é o expoente crítico dinâmico, os efeitos quânticos serão irrelevantes sempre que $|t| \ll t_x \sim T_c^{1/z\nu}$. Isso mostra que o comportamento crítico assintótico perto da transição será clássico para qualquer temperatura finita, mesmo que muito baixa.

Esta situação é alterada quando se considera uma transição de fase a temperatura nula. Neste caso, a transição é obtida variando-se um parâmetro não-térmico B como, por exemplo, um campo externo. As fases são então separadas pelo ponto crítico B_c , sendo a distância com relação ao mesmo definida agora por $t \equiv (B - B_c)/B_c$, pois como $T_c = 0$ a definição de t dada acima torna-se inaplicável. Observa-se com isso que $t_x = 0$, mostrando que a condição $|t| < t_x$ nunca é satisfeita e que a Mecânica Quântica teria um papel importante

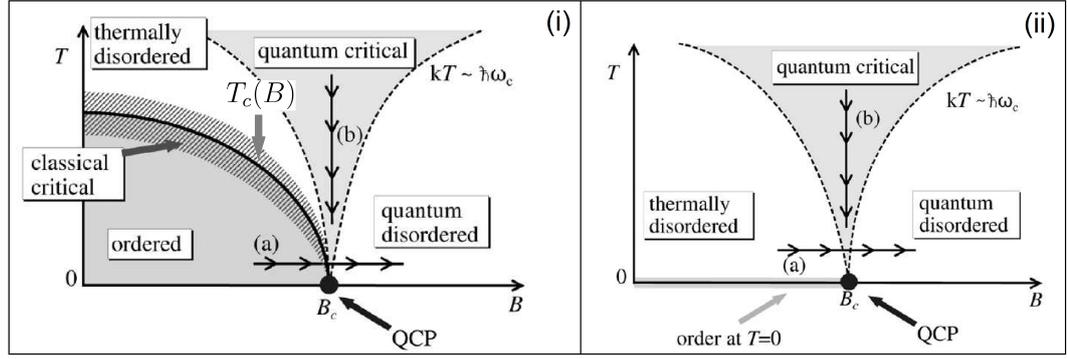


FIGURA 4.1: (i) Diagrama de fase no caso onde a fase ordenada se mantém a temperatura finita. A fronteira entre as fases ordenada e desordenada é representada pela linha sólida que termina no ponto crítico quântico B_c . A região hachurada em torno da linha sólida indica onde o comportamento crítico pode ser explicado classicamente. A fase ordenada encontra-se abaixo da linha sólida ($B < B_c$). A fase desordenada é dividida em três regiões, sendo a região entre as linhas tracejadas chamada de região crítica quântica onde as flutuações térmicas e quânticas exercem um papel importante. Para $B > B_c$ e baixas temperaturas a ordem é destruída pelas flutuações quânticas enquanto que na região chamada “thermally disordered” as flutuações térmicas são responsáveis por destruir a ordem. (ii) Diagrama de fase onde a fase ordenada existe apenas para $T = 0$. (Essa figura foi retirada da Ref. [91])

na descrição do comportamento crítico. Ainda, como em $T = 0$ não há flutuações térmicas, atribui-se as flutuações quânticas a responsabilidade da quebra da ordem de longo alcance. Uma transição de fase dessa natureza é denominada *transição de fase quântica*. Como a temperatura é nula o comportamento da energia livre é determinado pela energia do estado fundamental $E_0(B)$. Uma não-analiticidade em $E_0(B)$ pode ocorrer devido ao um cruzamento de níveis, ou seja, quando um estado excitado torna-se fundamental, anulando o *gap* Δ_{gap} entre os dois estados. Tal comportamento caracteriza uma transição de primeira ordem¹⁴. Outra possibilidade consiste na existência de um *gap* Δ_{gap} que se anula no ponto crítico B_c apenas no limite termodinâmico, sem a necessidade de um cruzamento de níveis. Nessa situação a não-analiticidade está associada a uma transição de segunda ordem. Além disso, a escala de energia definida por ω_c coincide com Δ_{gap} , isto é:

$$\Delta_{gap} \sim \xi^{-z}. \quad (4.19)$$

¹⁴Embora os cruzamentos de níveis ocorram em sistema finitos, apenas aqueles que sobrevivem no limite termodinâmico caracterizam uma transição de primeira ordem.

No intuito de esclarecer um pouco mais os conceitos apresentados até aqui, vamos analisar os diagramas de fase da figura (4.1), discutidos na Ref. [91]. Na figura (4.1)-(i) nota-se a existência de uma fase ordenada para $B < B_c$ que se mantém até uma temperatura crítica definida pela linha sólida $T_c(B)$. Conforme a temperatura aumenta o sistema irá sofrer uma transição de fase contínua em $T_c(B)$ atingindo assim uma fase desordenada onde as flutuações térmicas irão prevalecer. Por outro lado, para $T < T_c(B)$ fixo a transição também pode ser obtida variando-se o parâmetro B . A transição da fase ordenada para a fase desordenada neste caso ocorre para algum $B = B(T) < B_c$. Dentro da região hachurada o comportamento crítico pode ser descrito em termos da Física Clássica, mas conforme a temperatura diminui essa região também diminui. Entretanto, apenas assintoticamente perto de $B = B_c$ e $T = 0$ as propriedades críticas serão dominadas pelas flutuações quânticas. Um comportamento intrigante ocorre na região entre as linhas tracejadas, conhecida como região crítica quântica, onde tanto as flutuações térmicas quanto as quânticas são importantes. Esta região está localizada em torno do ponto crítico B_c e surpreendentemente resiste aos efeitos térmicos¹⁵. Para temperaturas finitas existe um outro comprimento característico, o comprimento de onda de de Broglie térmico, $\hbar c/kT$. Na região quântica crítica, $\xi > \hbar c/kT$, a dinâmica do sistema não admite uma descrição em termos de partículas ou ondas clássicas [89].

Como dito acima, a Mecânica Quântica não é necessária na descrição de um transição de fase a temperatura finita. No caso $T = 0$ observa-se que a condição (4.17) é violada e espera-se portanto que a Mecânica Quântica seja necessária na explicação das transições de fases. Entretanto, mesmo no caso $T = 0$, ainda é possível obter uma abordagem clássica das transições. Uma maneira simples de verificar isso consiste em observar que a função de partição de um sistema quântico d -dimensional pode ser vista como a função de partição de um sistema clássico de dimensão $d + 1$ no limite de $T \rightarrow 0$. Antes de discutir tal correspondência é importante notar que na mecânica estatística clássica a energia cinética H_K comuta com a energia potencial H_V , logo a função de partição

¹⁵O diagrama de fase apresentado aqui é válido quando a energia térmica é inferior ao acoplamento entre os spins J .

Z pode ser fatorada¹⁶ como $Z = \text{Tre}^{-\beta H_K} \text{Tre}^{-\beta H_V}$. Como geralmente a parte cinética da energia livre é bem comportada (envolvendo integrais gaussianas), as singularidades na energia livre surgem devido a energia potencial e o estudo do comportamento pode ser feito usando teorias independentes do tempo. O mesmo não ocorre no caso quântico pois os termos cinético e potencial do Hamiltoniano geralmente não comutam. Agora, para entender melhor a correspondência acima note que a função de partição associada ao Hamiltoniano H :

$$Z = \text{Tre}^{-\beta H} = \sum_n \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle, \quad (4.20)$$

é equivalente ao operador de evolução temporal $e^{-iHt/\hbar}$ se identificarmos t como o tempo imaginário $t = -i\hbar\beta$. Portanto, calcular as propriedades termodinâmicas de um sistema quântico é equivalente a calcular a dinâmica no tempo imaginário. Se δt é um intervalo de tempo (imaginário) pequeno com relação as escalas relevantes e $N \gg 1$ um inteiro tal que $N\delta t = \hbar\beta$, então $e^{-\beta H} = (e^{-\delta t H/\hbar})^N$. Inserido um base completa de estados $\{|m_k\rangle\}$ de um operador que não comuta com H entre os termos da eq.(4.20):

$$Z = \sum_n \sum_{m_1, \dots, m_N} \langle n | e^{-\delta t H/\hbar} | m_1 \rangle \langle m_1 | e^{-\delta t H/\hbar} | m_2 \rangle \dots \langle m_N | e^{-\delta t H/\hbar} | n \rangle. \quad (4.21)$$

Esta expressão da função de partição quântica possui a mesma forma da função de partição clássica se o termo $e^{-\delta t H/\hbar}$ for identificado como a matriz de transferência \mathbf{M} , ou seja:

$$Z = \sum_n \sum_{m_1, \dots, m_N} M_{n, m_1} M_{m_1, m_2} M_{m_2, m_3} \dots M_{m_N, n}. \quad (4.22)$$

O tempo da evolução temporal é determinado pelo intervalo $[0, \hbar\beta]$. No limite de T tendendo a zero este intervalo é reescrito como $[0, \infty)$. Essa dimensão temporal extra corresponde a uma dimensão espacial adicional no sistema clássico, resultando numa dimensão total igual a $d + 1$. Esta correspondência não implica que o sistema quântico se comporta classicamente, mas que é possível encontrar um modelo clássico que nos permite estudar uma transição de fase quântica usando as mesmas ferramentas das transições “clássicas”.

¹⁶Pois os momentos e posições das partículas comutam entre si.

Como um exemplo desta correspondência considera-se o modelo de Ising unidimensional clássico introduzido na seção 1.2, cuja matriz de transferência é dada pela eq.(4.11):

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \exp(J\beta + h\beta) & \exp(-J\beta) \\ \exp(-J\beta) & \exp(J\beta - h\beta) \end{pmatrix} = e^{J\beta} (1 + e^{-2J\beta} \hat{\sigma}^x) e^{a\tilde{h}\hat{\sigma}^z}, \quad (4.23)$$

onde $\hat{\sigma}^x$ e $\hat{\sigma}^z$ são as matrizes de Pauli e $\tilde{h} \equiv h/a$ é o campo magnético por unidade de comprimento. Ao invés de imaginar uma rede unidimensional em que a matriz de transferência \mathbf{M} leva informação de um sítio para outro, pode-se imaginar a evolução temporal de um único spin onde cada sítio da rede representa um instante de tempo e a distância entre os sítios a um passo de tempo. Para J finito e para $T \rightarrow 0$ tem-se que o comprimento de correlação (4.16) pode ser aproximado por $\xi \approx ae^{2J\beta}/2$. Usando isso e assumindo também que $a \rightarrow 0$ a eq.(4.23) pode ser reescrita da seguinte forma¹⁷:

$$\mathbf{M} = e^{J\beta} (1 + e^{-2J\beta} \hat{\sigma}^x) e^{a\tilde{h}\hat{\sigma}^z} \approx e^{J\beta} \left(1 + \frac{a}{2\xi} \hat{\sigma}^x\right) e^{a\tilde{h}\hat{\sigma}^z} \approx e^{a(-E_0 + \frac{1}{2\xi} \hat{\sigma}^x + \tilde{h}\hat{\sigma}^z)} \quad (4.24)$$

onde $E_0 = -J\beta/a$ é a energia do estado fundamental por unidade de comprimento na ausência do campo h . Com isso é fácil obter a função de partição:

$$Z = \text{Tr}(M)^N \approx \text{Tr}e^{-H_Q/\tilde{T}}, \quad (4.25)$$

onde o Hamiltoniano de um único spin é dado por:

$$H_Q = E_0 - \frac{\Delta_{gap}}{2} \hat{\sigma}^x - \tilde{h}\hat{\sigma}^z, \quad (4.26)$$

com $\tilde{T} \equiv 1/L_\tau$ e $\Delta_{gap} \equiv 1/\xi$. Note que o comprimento de correlação é o inverso do *gap* Δ_{gap} entre os estados fundamental e excitado do Hamiltoniano H_Q , como mencionado anteriormente e, além disso, que a “temperatura” \tilde{T} corresponde ao inverso do comprimento da cadeia de spins clássica. Este exemplo mostra explicitamente como um sistema clássico de dimensão $d + 1$ (neste caso $d = 0$) é mapeado em um sistema quântico de dimensão $d(= 0)$.

A possibilidade de construir um correspondente clássico de um sistema quântico, possibilitando o uso das técnicas desenvolvidas no estudo de transições

¹⁷Utiliza-se também a relação $e^{aO_1} e^{aO_2} = e^{a(O_1+O_2)}(1 + \mathcal{O}(a^2))$

clássicas para investigar as transições de fase quânticas levanta um importante questão: existe a necessidade de desenvolver uma teoria destinada exclusivamente ao estudo das transições de fase quânticas? Como discutido em [89], embora tal correspondência seja sempre possível, pode ocorrer do modelo clássico ser desconhecido ou com fatores de Boltzmann complexos. Além disso, existe um grande interesse no estudo da criticalidade quântica, que envolve a análise das funções de correlação temporal. No entanto, as funções de correlação obtidas através deste mapeamento são para tempos imaginários, e muitas vezes não é possível obter as funções correspondentes à dinâmica em tempo real. Outros pontos que justificam o desenvolvimento de uma teoria para as transições de fase quânticas são encontrados na Ref. [89].

Capítulo 5

Transições de Fase Quânticas e Correlações Quânticas a Temperatura Finita

O objetivo deste Capítulo é estudar o comportamento das correlações quânticas em cadeias de spins a temperatura finita, principalmente nas vizinhanças de um ponto crítico quântico. Com isso, pretendemos investigar a relação entre as correlações quânticas e as transições de fase quânticas.

5.1 Introdução

No Capítulo anterior introduziu-se o conceito de transição de fase quântica (TFQ) - uma transição entre diferentes fases que ocorre em $T = 0K$ devido a variação de algum parâmetro de controle, presente no Hamiltoniano que descreve o sistema físico. Neste regime de temperatura zero, um sistema de muitas partículas encontra-se no seu estado fundamental¹ que, em algumas situações, é descrito por uma função de onda não-trivial, exibindo correlações de longo alcance entre os constituintes do sistema. Na Ref. [22], J. Preskill observou que o emaranhamento presente no estado fundamental poderia ser responsável

¹Estamos assumindo que o sistema está em equilíbrio com um reservatório térmico a temperatura T e que seu estado é descrito pelo *ensemble* de Gibbs.

por estas correlações. Dessa forma, os métodos desenvolvidos pela Teoria de Informação Quântica poderiam ser utilizados no estudo do comportamento crítico de sistemas de muitas partículas. Além disso, estes sistemas poderiam servir de plataformas para a implementação de protocolos associados a Computação e Informação Quântica.

Um dos primeiros trabalhos referente ao estudo do emaranhamento no âmbito da Matéria Condensada foi realizado por M. A. Nielsen, através da análise do emaranhamento do modelo de Heisenberg para dois spins [12]. Este trabalho foi generalizado em 2001 por M. C. Arnesen e colaboradores [92] que, através de métodos numéricos, investigaram o comportamento do emaranhamento para o modelo de Heisenberg com um número pequeno de spins, dispostos em uma cadeia unidimensional. Neste trabalho eles mostraram que na presença de um campo externo o emaranhamento poderia aumentar mediante um aumento da temperatura. Tal resultado também foi observado para o modelo de Ising [93].

A relação entre o emaranhamento e as transições de fase quânticas começou a ser estabelecida nos trabalhos realizados por T. J. Osborne e M. A. Nielsen [23; 24] e por A. Osterloh e colaboradores [25], através da análise do comportamento crítico do modelo XY unidimensional em um campo magnético transversal. Como discutido no Capítulo 4 da Ref. [88], dois importantes resultados foram obtidos nestes trabalhos²: 1) o emaranhamento bipartido entre dois spins primeiros vizinhos não era máximo no ponto crítico e 2) o emaranhamento entre dois spins era nulo no modelo de Ising se os dois spins estivessem separados por dois ou mais sítios. Apesar do emaranhamento não ser máximo no ponto crítico, A. Osterloh e colaboradores [25] mostraram que a primeira derivada da Concorrência entre primeiros vizinhos divergia no ponto crítico de forma logarítmica, sugerindo que o comportamento crítico do emaranhamento poderia ser utilizado para indicar a transição de fase quântica. Outra interessante conclusão diz respeito à natureza das correlações, segundo (2) a parte não-local das correlações é de curto alcance, mesmo no ponto crítico, quando as correlações entre os spins se estendem por toda a cadeia.

²A Ref. [88] é uma ótima sugestão de leitura pois oferece uma revisão detalhada sobre a conexão entre o emaranhamento e as transições de fase quânticas.

A influência da temperatura no comportamento do emaranhamento para uma cadeia infinita foi investigado por T. J. Osborne e M. A. Nielsen [23; 24]. Como no caso de cadeias de spins finitas [12; 92], existem regiões do espaço de parâmetros onde o emaranhamento aumenta com a temperatura³. Além disso, eles mostraram que a Entropia de Emaranhamento, utilizada para medir o emaranhamento entre um spin e o resto da cadeia, era máxima no ponto crítico. Porém, diferente do resultado anterior obtido por A. Osterloh e colaboradores [25] para a Concorrência, neste caso não foi possível determinar como o emaranhamento estava distribuído, ou seja, se o spin está emaranhando com toda a cadeia ou apenas com o seu primeiro vizinho.

A partir destes trabalhos, estudos desenvolvidos no intuito de entender o papel do emaranhamento na física de sistemas de muitas partículas começaram a receber uma grande atenção da comunidade científica. Uma boa revisão sobre o assunto é encontrada na Ref. [94]. Dentre os inúmeros trabalhos sobre este assunto, vamos destacar alguns resultados. Por exemplo, estudando o modelo XXZ unidimensional, Gu e colaboradores [95; 96] mostraram que a Concorrência é máxima no ponto isotrópico, ou seja, quando o sistema é descrito pelo modelo XXX. Uma relação mais geral entre o emaranhamento bipartido, calculado através da Concorrência ou Negatividade [97], e as transições de fase quânticas foi estabelecida no final de 2004 por Wu e colaboradores [98]. Sob algumas condições especiais e $T = 0K$, eles mostraram que uma descontinuidade na Concorrência é uma condição necessária e suficiente de uma transição de primeira-ordem, enquanto que uma descontinuidade na sua derivada caracteriza uma transição de segunda-ordem. As transições caracterizadas desta maneira estão associadas a não-analiticidades no espectro de energias. Isso acontece pois Wu e colaboradores [98] utilizaram o fato de que a energia de sistemas com interações de dois corpos é uma função dos elementos da matriz densidade reduzida de dois spins, assim como a Concorrência. Logo, é possível estabelecer uma relação entre a Concorrência e a não-analiticidade da energia do estado fundamental, utilizada para caracterizar as TFQ de primeira e segunda-ordem. Como demonstrado nas Refs. [99–101],

³É importante mencionar que esse aumento do emaranhamento com a temperatura foi observado apenas na presença de um campo externo.

este resultado também pode ser estendido para o emaranhamento multipartido.

A busca por uma conexão entre o emaranhamento e as TFQ's levou a uma importante questão: qualquer medida de emaranhamento poderia ser usada para caracterizar um ponto crítico? A resposta para esta pergunta foi dada novamente por Wu e colaboradores [102], usando o formalismo de funcional densidade. Eles demonstraram que qualquer medida de emaranhamento pode ser expressa através de um único funcional⁴, escrito em termos das primeiras derivadas da energia do estado fundamental, ou seja, as não-analiticidades das derivadas da energia são herdadas pelas medidas de emaranhamento. Entretanto, nas situações onde a TFQ não está relacionada com uma não-analiticidade na energia os resultados acima não podem ser aplicados. Isso ocorre, por exemplo, no modelo XXZ anti-ferromagnético [103], onde há uma TFQ e todas as derivadas da energia são contínuas⁵. Esta transição é denominada de transição de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless. Além disso, medidas de emaranhamento como a Concorrência, que envolvem um processo de maximização [veja eq. (2.13)], podem apresentar não-analiticidades que não estão relacionadas com nenhuma TFQ. Por exemplo, na Ref. [104] observa-se uma descontinuidade na primeira derivada da Concorrência na ausência de um ponto crítico.

Como discutido no Capítulo 1, existem correlações quânticas que não estão associadas necessariamente ao emaranhamento. Logo, é natural questionar o papel destas correlações no comportamento de sistemas de muitas partículas, principalmente no que se refere a transições de fase quânticas. O primeiro trabalho a abordar esta questão foi desenvolvido por R. Dillenschneider e publicado no final de 2008 [26]. Primeiramente, R. Dillenschneider mostrou que os argumentos apresentados por Wu e colaboradores [98] para a Concorrência (e Negatividade), também poderiam ser aplicados a Discórdia Quântica. Em outras palavras, sob as condições mencionadas em [98], pode-se caracterizar uma transição de primeira-ordem através de uma descontinuidade na Discórdia Quântica e uma transição de segunda-ordem por uma descontinuidade ou divergência na primeira derivada da Discórdia. Este resultado foi ilustrado através da análise do modelo

⁴Entretanto, na maioria dos casos não é possível obter uma forma explícita para o funcional.

⁵Transições em que todas as derivadas da energia do estado fundamental são contínuas são denominadas transições de ordem infinita.

de Ising unidimensional (1D) no campo transversal e no regime de temperatura nula, envolvendo o cálculo da Discórdia para primeiros e segundos vizinhos. Ainda neste trabalho, R. Dillenschneider mostrou que o máximo da Discórdia coincide com o ponto crítico associado a transição de ordem infinita presente no modelo XXZ⁶.

Em 2009, M. S. Sarandy [105] apresentou uma análise da Discórdia para o modelo de Ising 1D no campo transversal em função do comprimento da cadeia L para $T = 0K$, mostrando que a segunda derivada da Discórdia apresenta uma divergência logarítmica no ponto crítico para $L \rightarrow \infty$ (limite termodinâmico). Neste mesmo trabalho ele mostrou que as duas TFQ do modelo XXZ e a transição de segunda-ordem do modelo LMG [106] são bem caracterizadas pela Discórdia⁷. Na Ref. [107], J. Maziero e colaboradores investigaram o comportamento da Discórdia no modelo XY 1D no campo transversal entre dois spins separados por mais de um sítio. Diferente do emaranhamento, que torna-se nulo quando a distância entre os spins é superior a um sítio [23–25], a Discórdia permanece diferente de zero mesmo quando os spins estão separados por três sítios. Além disso, mesmo neste caso, a Discórdia ainda é capaz de assinalar o ponto crítico. Portanto, embora a parte não-local das correlações seja de curto alcance, existe uma componente quântica que pode ser responsável pelas correlações de longo alcance.

Em [108] observamos também uma vantagem da Discórdia Quântica perante o emaranhamento na caracterização das TFQ. Neste trabalho, Zhao-Yu Sun e colaboradores mostram que embora tanto a Discórdia quanto a Concorrência identifiquem a transição de primeira-ordem (em $g = 0$) presente no Hamiltoniano

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N [2(g^2 - 1)\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z - (1 + g)^2 \hat{\sigma}_i^x + (1 - g)^2 \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^x \hat{\sigma}_{i+2}^z], \quad (5.1)$$

que descreve o modelo de Ising transversal com a adição de uma interação de três corpos⁸, a Concorrência exibe uma segunda singularidade no ponto *não*-crítico

⁶Como demonstrado por Gu e colaboradores [95; 96], a Concorrência também exibe um máximo neste ponto crítico.

⁷O modelo LMG pode ser visto como um anel unidimensional de partículas com spin-1/2 cuja interação entre duas partículas possui um alcance infinito.

⁸Assumindo condições de contorno periódicas.

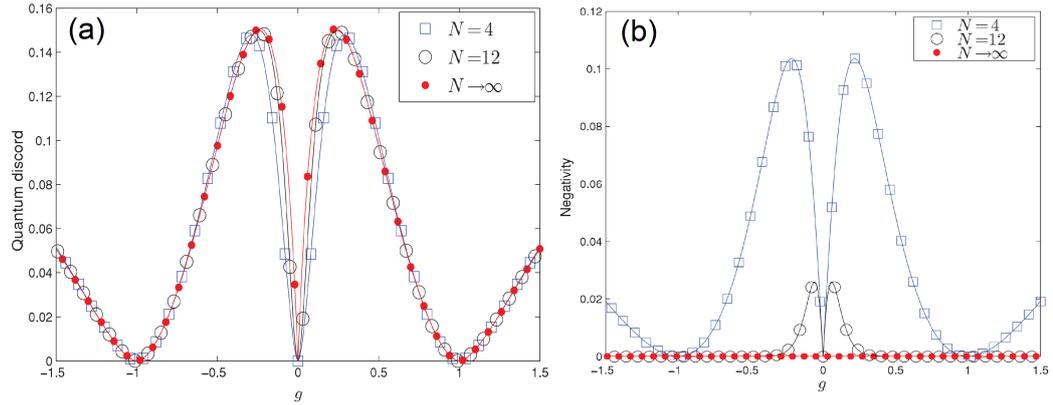


FIGURA 5.1: (Retirada da Ref. [108]) Discórdia Quântica (a) e Negatividade (b) entre segundos vizinhos em função do parâmetro g para distintos valores de N .

$g = 1$. Investigando o modelo XYZ descrito pelo Hamiltoniano

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{1+g^2}{2} \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x - (1-g) \hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^y - (1+g) \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z + (1-g^2) \hat{\sigma}_i^x \right), \quad (5.2)$$

os autores mostraram também que a Discórdia e a Negatividade possuem dependências distintas com relação a N [veja a Figura (5.1)]. Note que a Discórdia Quântica, Fig. (5.1a), apresenta praticamente o mesmo comportamento, independente do valor de N , enquanto que a Negatividade, Fig. (5.1b), tende a zero conforme o sistema se aproxima do limite termodinâmico⁹ ($N \rightarrow \infty$). Neste caso, o ponto crítico $g = 0$ é determinado apenas pela Discórdia Quântica.

5.1.1 Discórdia Quântica num Sistema Térmico

Os estudos teóricos mencionados até este momento, envolvendo o uso de correlações quânticas no intuito de determinar uma transição de fase quântica, são restritos ao caso $T = 0K$. No entanto, este regime de temperatura nula não pode ser atingido experimentalmente pois, segundo a Terceira Lei da Termodinâmica, é impossível resfriar um sistema até o zero absoluto através de um número finito de operações termodinâmicas [109]. Portanto, esta limitação inviabiliza uma comparação entre os resultados teóricos e os dados experimentais, obtidos para temperaturas finitas. Para contornar este problema é necessário investigar o comportamento das correlações quânticas num sistema em equilíbrio térmico

⁹A Concorrência também tende a zero para $N \rightarrow \infty$ [108].

com um reservatório a temperatura T finita. Segundo a prescrição da Mecânica Estatística, o estado do sistema é descrito pelo *ensemble* de Gibbs [27; 37]:

$$\rho_T = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{Z}, \quad (5.3)$$

onde $Z = \text{Tr} \left(e^{-\beta\hat{H}} \right)$ é a função de partição, \hat{H} é o Hamiltoniano do sistema e $\beta = 1/kT$. O parâmetro k denota a constante de Boltzmann.

O emaranhamento associado aos operadores densidade da forma (5.3), denominado *emaranhamento térmico*, foi estudado pela primeira vez por M. C. Arnesen e colaboradores [92] para uma cadeia de Heisenberg unidimensional e finita. Posteriormente, outros trabalhos investigaram como o emaranhamento era afetado pelos efeitos térmicos ainda no contexto de cadeias de spins, tanto para cadeias finitas [110–113] quanto infinitas [114]. Entretanto, o foco destes trabalhos não estava voltado ao estudo da capacidade do emaranhamento na detecção de pontos críticos quânticos para $T > 0$. Em 2010, eu e o Prof. Gustavo G. Rigolin introduzimos a *Discórdia Quântica Térmica* (TQD) [115], um conceito análogo ao emaranhamento térmico, e estudamos o comportamento desta quantidade num sistema constituído de dois spins, descrito pelo modelo XYZ na presença de um campo magnético externo. Neste trabalho nós observamos pela primeira vez um indicativo de que a TQD poderia ser utilizada na detecção de uma TFQ para $T > 0$. É importante deixar claro que embora a TFQ ocorra em $T = 0K$, como discutido no Capítulo anterior, seus efeitos podem ser observados para temperaturas finitas. O que o nosso resultado sugere é que a TQD calculada para $T > 0$, poderia assinalar um ponto crítico quântico em $T = 0K$.

Para investigar essa possibilidade, nós estudamos o modelo XXZ no limite termodinâmico para diferentes temperaturas [116]. Dessa forma, analisando uma cadeia de spins infinita, foi possível mostrar pela primeira vez que a TQD é capaz de detectar os dois pontos críticos presentes neste modelo mesmo para $T \neq 0$, enquanto que o emaranhamento e outras quantidades termodinâmicas não apresentam a mesma eficiência. Este resultado foi generalizado em 2011, através da inclusão de um campo externo ao modelo XXZ e da análise do modelo XY também na presença de um campo externo [117]. Recentemente, nós escrevemos um *review* contendo os nossos principais resultados [118].

5.2 Dois Spins Interagentes: Modelo XYZ

O primeiro sistema estudado neste capítulo consiste de dois spins interagentes submetidos à ação de um campo magnético externo B , descrito pelo Hamiltoniano (assumindo $\hbar = 1$) [115]

$$H_{xyz} = \frac{J_x}{4} \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x + \frac{J_y}{4} \hat{\sigma}_1^y \hat{\sigma}_2^y + \frac{J_z}{4} \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_2^z + \frac{B}{2} (\hat{\sigma}_1^z + \hat{\sigma}_2^z), \quad (5.4)$$

onde $\hat{\sigma}_j^\alpha$ ($\alpha = x, y, z$) são as matrizes de Pauli que atuam sobre o j -ésimo spin. Este Hamiltoniano corresponde ao modelo XYZ. O operador densidade que descreve o estado térmico deste sistema é obtido através da equação (5.3) e pode ser escrito da seguinte forma:

$$\rho = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} A_{11} & 0 & 0 & A_{12} \\ 0 & B_{11} & B_{12} & 0 \\ 0 & B_{12} & B_{11} & 0 \\ A_{12} & 0 & 0 & A_{22} \end{pmatrix}, \quad (5.5)$$

onde

$$\begin{aligned} A_{11} &= e^{-\alpha} (\cosh(\xi) - 4B \sinh(\xi)/\eta), \\ A_{12} &= -\Delta e^{-\alpha} \sinh(\xi)/\eta, \\ A_{22} &= e^{-\alpha} (\cosh(\xi) + 4B \sinh(\xi)/\eta), \\ B_{11} &= e^\alpha \cosh(\gamma), \\ B_{12} &= -e^\alpha \sinh(\gamma), \end{aligned}$$

com

$$Z = 2 [\exp(-\alpha) \cosh(\xi) + \exp(\alpha) \cosh(\gamma)],$$

onde

$$\alpha = \frac{J_z}{(4kT)}, \quad \xi = \frac{\eta}{(4kT)}, \quad \gamma = \frac{\Sigma}{(4kT)},$$

e

$$\Delta = J_x - J_y, \quad \Sigma = J_x + J_y, \quad \eta = \sqrt{\Delta^2 + 16B^2}.$$

O primeiro resultado importante aparece na ausência do campo externo. Segundo a Ref. [113], quando $B = 0$, o emaranhamento não cresce com o aumento da temperatura. Por outro lado, como visto na Figura (5.2), para o modelo XXZ ($J_x = J_y = J$ e $J_z \neq 0$), a TQD começa com um valor não-nulo em $T = 0$ e cresce com T até atingir um valor máximo, quando começa a decrescer, tendendo a zero para $T \rightarrow \infty$. Neste caso, o emaranhamento é igual a zero para qualquer valor de kT , inclusive para $kT = 0$ [113]. Note que este comportamento ocorre para distintos valores das constantes de acoplamento J e J_z .

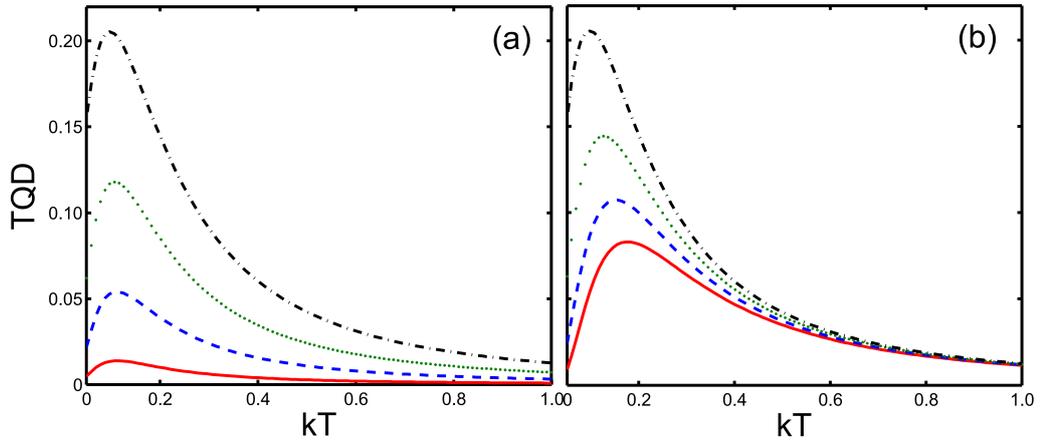


FIGURA 5.2: TQD em função da temperatura absoluta kT para o modelo XXZ com $B = 0$ e diferentes constantes de acoplamento. No painel (a) tem-se: $J_z = -0.5$ e $J = 0.1$ (linha sólida), 0.2 (linha tracejada), 0.3 (linha pontilhada), 0.4 (linha traço-pontilhada). No painel (b) tem-se: $J = 0.4$ e $J_z = -0.8$ (linha sólida), -0.7 (linha tracejada), -0.6 (linha pontilhada), -0.5 (linha traço-pontilhada).

A possibilidade de utilizar a TQD na detecção de uma TFQ mesmo quando o sistema encontra-se com uma temperatura finita surgiu do estudo do modelo XXX ($J_x = J_y = J_z = J$) para dois qubits. Quando $J \rightarrow \infty$ o operador densidade (5.5) adquire a forma $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ independente do valor de T , onde o estado $|\psi\rangle$ é o estado de Bell $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$. No limite oposto, $J \rightarrow -\infty$, o operador densidade torna-se o estado misto $\rho = \frac{1}{3}(|00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11| + |\phi\rangle\langle\phi|)$ com $|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$. Neste caso, o EoF é igual a zero enquanto que a TQD assume o valor $1/3$. No limite termodinâmico, este modelo apresenta uma TFQ em $J = 0$, ou seja, ele exibe uma fase ferromagnética para $J < 0$ e uma fase anti-ferromagnética para $J > 0$. Como pode ser visto na Figura (5.3), o EoF é zero na fase ferromagnética ($J < 0$) e diferente de zero na fase anti-ferromagnética

($J > 0$) apenas para temperatura próximas de $T = 0K$. Para $T > 0$, o EoF assume valores positivos somente quando $J > J_c(T) = kT \ln(3)$. Logo, neste caso o comportamento do EoF é o mesmo para $J < 0$ (fase ferromagnética) e $0 < J < J_c(T)$ (fase anti-ferromagnética). Por outro lado, a TQD é nula apenas no ponto crítico $J = 0$, inclusive para $T > 0$. Portanto, embora tenha-se considerado apenas um sistema constituído de dois spins, este resultado oferece um indício quanto a habilidade da TQD em assinalar a TFQ que ocorre em $T = 0$ (quando o sistema passa da fase anti-ferromagnética para a fase ferromagnética através da variação de J) mesmo para temperaturas finitas.

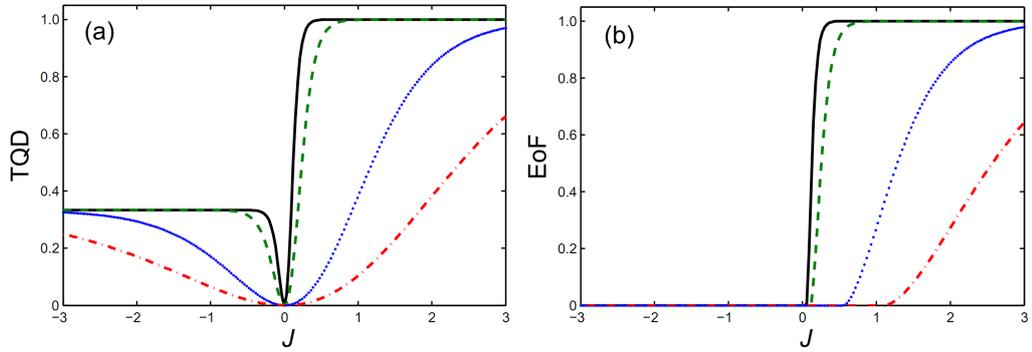


FIGURA 5.3: (a) TQD e (b) EoF em função da constante de acoplamento J para o modelo XXX ($J_x = J_y = J_z = J$) na ausência de campo externo ($B = 0$) para diferentes temperaturas: $kT = 0.05$ (linha sólida), 0.1 (linha tracejada), 0.5 (linha pontilhada), 1.0 (linha traço-pontilhada).

Nosso próximo passo é investigar o comportamento da TQD em função das constantes de acoplamento para diferentes temperaturas. A dependência da TQD e do EoF com relação ao parâmetro $\Delta = J_x - J_y$ para J_z fixo é ilustrada na Figura (5.4). Note que para $kT = 0.6$ e $kT = 1.0$ a TQD apresenta um “bico” no ponto $\Delta = 0$, caracterizando uma descontinuidade na primeira derivada da TQD. Esta descontinuidade é análoga àquela observada no Capítulo anterior [Fig. (3.7)], quando estudamos a dinâmica da Discórdia Quântica oriunda da interação com um reservatório térmico. Entretanto, naquela ocasião, o bico estava associado a dinâmica do sistema¹⁰, enquanto que aqui ele aparece quando variamos os parâmetros do Hamiltoniano. Porém, em ambos os casos, a origem desta mudança súbita da Discórdia Quântica é a mesma, ou seja, uma troca nos projetores que

¹⁰As descontinuidades na primeira derivada da Discórdia Quântica dependiam de valores específicos do tempo de evolução do sistema.

minimizam a entropia condicional quântica (2.30). Note também que o EoF não apresenta este comportamento peculiar [veja a Fig. (5.4b)]. Para $kT = 0.6$ o bico da TQD coincide com um máximo local do EoF, enquanto que para $kT = 1.0$ o EoF é zero nesta região. A Figura (5.4c) mostra que a TQD também apresenta um bico conforme variamos o acoplamento J_z , mantendo Δ fixo. Novamente, tal comportamento não é apresentado pelo EoF.

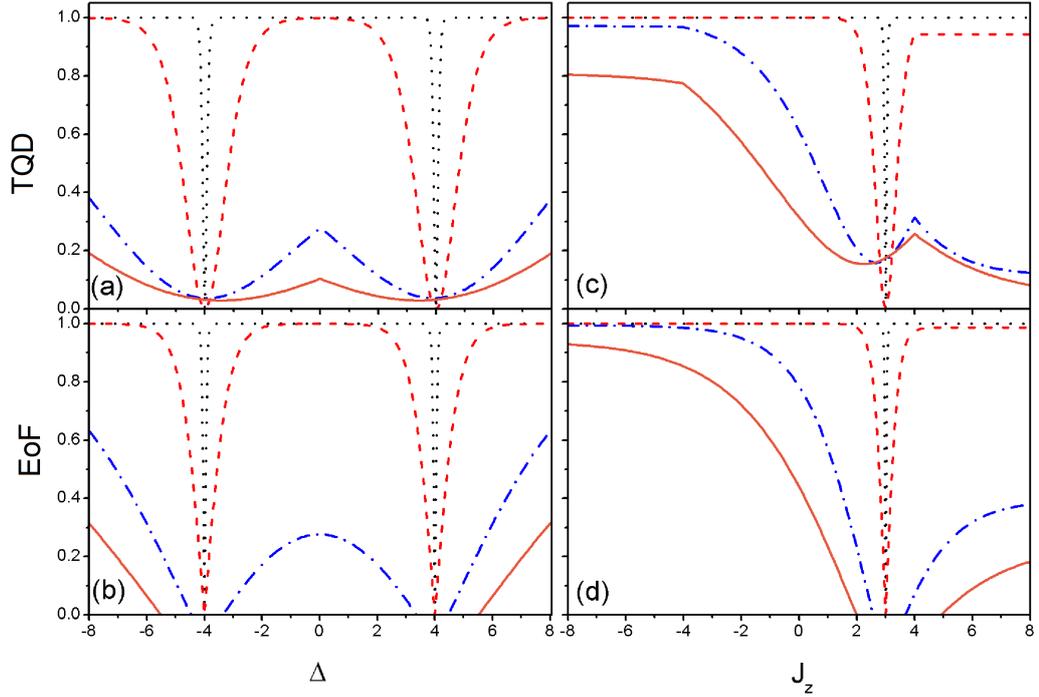


FIGURA 5.4: (a) TQD e (b) EoF em função do parâmetro $\Delta = J_x - J_y$ para $J_x + J_y = 2$ e $J_z = 1$. (c) TQD e (d) EoF em função da constante de acoplamento J_z para $J_x + J_y = 1$ e $\Delta = 7$. Utilizou-se diferentes valores de temperatura absoluta: $kT = 1.0$ (linha sólida), 0.6 (linha traço-pontilhada), 0.1 (linha tracejada), 0.01 (linha pontilhada).

Até o momento não levamos em conta a ação do campo magnético externo B . Para investigar a sua influência vamos considerar inicialmente o modelo de Ising ($J_x = J$ e $J_y = J_z = 0$). Segundo a Figura (5.5), a TQD e o EoF apresentam comportamentos similares. Embora o EoF seja zero numa região considerável do plano $B \times kT$, a TQD, apesar de positiva, assume valores muito pequenos nesta região. Além disso, assim como o EoF [110], a TQD sofre um crescimento inicial conforme B aumenta, mas tende a zero para $B \rightarrow \infty$. Neste limite o estado do sistema é puro e separável para qualquer valor de temperatura, $\rho = |11\rangle\langle 11|$. Por outro lado, como veremos a seguir, para outros modelos o comportamento

da TQD e do EoF na presença de um campo externo pode exibir características distintas.

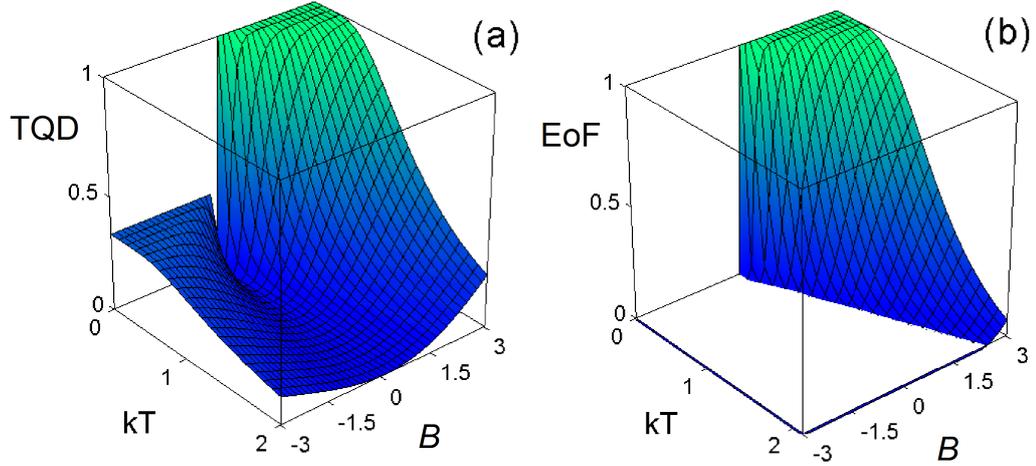


FIGURA 5.5: (a) TQD e (b) EoF em função da temperatura absoluta kT e do campo magnético externo B para o modelo de Ising ($J_x = J$ e $J_y = J_z = 0$) com $J = 1$.

Para o modelo XY ($J_x, J_y \neq 0$ e $J_z = 0$) com um campo transversal ($B \neq 0$), a TQD apresenta um comportamento bem distinto daquele obtido para o modelo de Ising. Primeiramente, observe na Figura (5.6b) que a TQD decresce conforme T aumenta até que a temperatura alcance um valor crítico T_c , a partir do qual a TQD começa a crescer novamente. Diferente do EoF, que sofre uma morte súbita para então voltar a crescer [110], a TQD não precisa atingir o valor zero para tornar a aumentar. Este novo efeito recebeu o nome de *regrowth* da Discórdia Quântica¹¹. Este fenômeno não é observado no EoF de um sistema de dois spins¹². Analisando as curvas das Figs. (5.6a) e (5.6c), nota-se que a TQD torna-se diferente de zero antes do EoF e, além disso, permanece não-nula mesmo após o EoF atingir o valor zero. Agora, observe nas Figs. (5.6b) e (5.6d) que, para os três valores de B testados, existem regiões onde um aumento da TQD é seguido por uma redução no valor do EoF. Este resultado ilustra bem os diferentes aspectos destas duas medidas de correlações quânticas. Recentemente, X. Rong e colaboradores [119] verificaram experimentalmente alguns dos comportamentos

¹¹Este termo apareceu pela primeira vez no meu trabalho de 2010 [115], desenvolvido em parceria com o Prof. Gustavo G. Rigolin.

¹²Entretanto, quando estudamos o limite termodinâmico deste modelo na Ref. [117], mostramos que o EoF também pode exibir este efeito. Este resultado será apresentado na próxima seção.

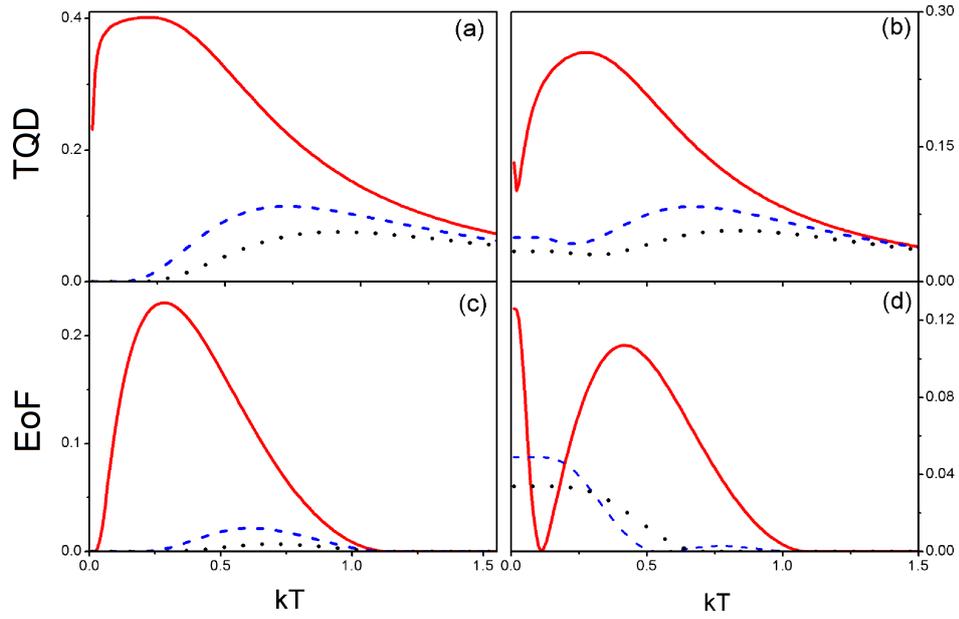


FIGURA 5.6: TQD (a e b) e EoF (c e d) em função da temperatura absoluta kT para o modelo XY ($J_x, J_y \neq 0$ e $J_z = 0$) no campo transversal B . Para (a) e (b) usamos $J_x = J_y = 1$ enquanto que para (b) e (d) usamos $J_x = 1.3$ e $J_y = 0.7$. Os valores de B utilizados foram: $B = 1.1$ (linha sólida), 2.0 (linha tracejada), 2.5 (linha pontilhada)

preditos nesta seção, inclusive a mudança súbita da Discórdia Quântica através da variação do acoplamento entre os spins no regime de temperaturas finitas.

5.3 Modelo XXZ

O primeiro modelo a ser estudado no limite termodinâmico é o modelo XXZ na presença de um campo magnético h na direção z , dado pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\hat{H}_{xxz} = J \sum_{j=1}^N (\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x + \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y + \Delta \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z) - \frac{h}{2} \sum_{j=1}^N \hat{\sigma}_j^z, \quad (5.6)$$

onde N é o número total de spins, J a constante de acoplamento (assumimos $J = 1$) e Δ o parâmetro que controla a anisotropia do sistema. Dessa forma, podemos definir um Hamiltoniano adimensional \hat{H}_{xxz}/J que coincide com \hat{H}_{xxz} para $J = 1$. Vamos assumir também condições de contorno periódicas, $\hat{\sigma}_{N+1}^\alpha = \hat{\sigma}_1^\alpha$, tornando o sistema invariante por translações. Além disso, este Hamiltoniano possui tanto a simetria \mathbf{Z}_2 , ou seja, é invariante por uma rotação global de π

em torno do eixo z ($[\hat{H}_{xxz}, \prod_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^z] = 0$), quanto a simetria $U(1)$, caracterizada pela relação $[\hat{H}_{xxz}, \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^z] = 0$. Para investigar as transições de fase quânticas é necessário compreender o comportamento do estado fundamental. Por exemplo, no limite de $\Delta \rightarrow -\infty$ o estado fundamental do Hamiltoniano (5.6) é duplamente degenerado e determinado pelo operador densidade¹³:

$$\rho_{\Delta \rightarrow -\infty} = \frac{1}{2} |\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle \langle \uparrow\uparrow \dots \uparrow| + \frac{1}{2} |\downarrow\downarrow \dots \downarrow\rangle \langle \downarrow\downarrow \dots \downarrow|, \quad (5.7)$$

com todos os spins alinhados na mesma direção, caracterizando uma fase ferromagnética. No entanto, como observado no Capítulo anterior, a presença de perturbações externas leva a numa quebra espontânea desta simetria, favorecendo a existência de apenas um destes estados¹⁴. Isso justifica a observação de uma magnetização diferente de zero na fase ferromagnética¹⁵. Por outro lado, no limite oposto, $\Delta \rightarrow \infty$, o estado fundamental é representado pelo operador densidade:

$$\rho_{\Delta \rightarrow \infty} = \frac{1}{2} |\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\rangle \langle \uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow| + \frac{1}{2} |\downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow\rangle \langle \downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow|, \quad (5.8)$$

caracterizando uma fase anti-ferromagnética, com os spins alinhados em direções opostas. Uma descrição detalhada do diagrama de fases do modelo XXZ é encontrada na Ref. [103]. O modelo XXZ apresenta dois pontos críticos, que dependem do valor do campo magnético h . Um deles, denotado por Δ_{inf} , é determinado pela equação:

$$h = 4J \sinh(\eta) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\cosh(n\eta)}, \quad (5.9)$$

com $\eta = \cosh^{-1}(\Delta_{inf})$, e descreve uma TFQ de ordem infinita, conhecida como transição de Kosterlitz-Thouless, para $h = 0$ e uma transição de segunda-ordem para $h > 0$. O outro ponto crítico, denotado por Δ_1 , está associado a uma TFQ de primeira-ordem, sendo obtido através da seguinte equação:

$$\Delta_1 = \frac{h}{4J} - 1. \quad (5.10)$$

¹³O estado fundamental do sistema ρ_0 é obtido da seguinte maneira:

$$\rho_0 = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{Z}.$$

¹⁴Nesta Tese os efeitos sobre as correlações quânticas da quebra espontânea de simetria não serão considerados. No caso do emaranhamento, estes efeitos foram estudados nas Refs. [88; 101; 120] e, no caso da Discórdia Quântica, na Ref. [121].

¹⁵Note que a magnetização calculada a partir do operador densidade (5.7) é nula.

Nesta seção vamos estudar a TQD e o EoF entre dois spins primeiros vizinhos, para tanto é necessário calcular o operador densidade referente a estes dois spins. Isso é feito tomando o traço parcial com relação aos demais spins da rede, ou seja, $\rho_{1,2} = \text{Tr}_{N-2}(\rho)$, onde ρ é determinado pela equação (5.3) ao utilizarmos o Hamiltoniano (5.6). Utilizando as simetrias do sistema é possível mostrar que o operador densidade reduzido $\rho_{1,2}$ pode ser escrito como [24; 122]:

$$\rho_{1,2} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{22} & \rho_{23} & 0 \\ 0 & \rho_{23} & \rho_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{44} \end{pmatrix}, \quad (5.11)$$

onde

$$\begin{aligned} \rho_{11} &= 1 + 2 \langle \hat{\sigma}^z \rangle + \langle \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_2^z \rangle, \\ \rho_{22} &= 1 - \langle \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_2^z \rangle, \\ \rho_{44} &= 1 - 2 \langle \hat{\sigma}^z \rangle + \langle \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_2^z \rangle, \\ \rho_{23} &= 2 \langle \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \rangle. \end{aligned}$$

A magnetização $\langle \hat{\sigma}^z \rangle$ e as funções de correlação de dois pontos $\langle \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \rangle$ e $\langle \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_2^z \rangle$ são expressas em termos das derivadas da energia livre, $f = -\frac{1}{\beta} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\ln Z}{L}$ [123; 124]:

$$\langle \sigma^z \rangle = -2 \partial_h f, \quad (5.12)$$

$$\langle \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \rangle = \partial_{\Delta} f / J, \quad (5.13)$$

$$\langle \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x \rangle = \frac{u - \Delta \partial_{\Delta} f + h \langle \sigma^z \rangle}{2J}, \quad (5.14)$$

$$\langle \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \rangle = \langle \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x \rangle = \frac{u + h \langle \sigma^z \rangle}{3J}, \quad \Delta = 1, \quad (5.15)$$

onde $u = \partial_{\beta}(\beta f)$ é a energia interna. O cálculo da energia livre f não é uma tarefa trivial e envolve tanto o uso de técnicas analíticas quanto métodos computacionais¹⁶. Por questão de completeza vou expor abaixo as equações que devem ser resolvidas para determinar f . A energia livre, obtida através da técnica

¹⁶Esta etapa do trabalho foi desenvolvida pelo Prof. Giuliano A. P. Ribeiro (DF/UFSCAR, São Carlos, Brasil) com a colaboração de Christian Trippe (Bergische Universität Wuppertal, Wuppertal, Alemanha).

de Bethe ansatz, pode ser escrita como [125]:

$$f = e_0 - \frac{1}{\beta} (V * \ln B \bar{B}) (0), \quad (5.16)$$

onde a energia do estado fundamental e_0 é dada por

$$\frac{e_0}{J} = \begin{cases} \cos \gamma - 2 \frac{\sin \gamma}{\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sinh(\frac{\pi}{\gamma} - 1) \frac{k}{2}}{2 \sinh \frac{\pi k}{2\gamma} \cosh \frac{k}{2}} dk, & 0 < \Delta \leq 1, \\ \cosh \gamma - 2 \sinh \gamma \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\gamma|k|}}{\cosh \gamma k}, & \Delta > 1, \end{cases} \quad (5.17)$$

e

$$V(x) = \begin{cases} \frac{\pi}{\cosh \pi x}, & 0 < \Delta \leq 1, \\ \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{e^{i2kx}}{2 \cosh \gamma k}, & \Delta > 1. \end{cases} \quad (5.18)$$

O símbolo $*$ denota a convolução $f * g(x) = \int_{-a}^a f(x-y)g(y)dy$, onde $a \rightarrow \infty$ para $0 < \Delta \leq 1$ e $a = \pi/2$ para $\Delta > 1$. As funções auxiliares $b(x)$, $\bar{b}(x)$, e as funções correlatas $B(x) = b(x) + 1$ e $\bar{B}(x) = \bar{b}(x) + 1$ são soluções do seguinte conjunto de equações integrais não-lineares [125; 126]:

$$\ln b(x) = d_+(x) + (K * \ln B)(x) - (K * \ln \bar{B})(x + i\gamma), \quad (5.19)$$

$$\ln \bar{b}(x) = d_-(x) + (K * \ln \bar{B})(x) - (K * \ln B)(x - i\gamma). \quad (5.20)$$

O termo $d_{\pm}(x)$ é dado por

$$d_{\pm}(x) = \begin{cases} -2J\beta \frac{\sin \gamma}{\gamma} \frac{\pi}{\cosh(\pi x/\gamma)} \pm \frac{\beta h}{2} \frac{\pi}{\pi - \gamma}, & 0 < \Delta \leq 1, \\ -2J\beta \sinh \gamma \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{e^{i2kx}}{\cosh \gamma k} \pm \frac{\beta h}{2}, & \Delta > 1, \end{cases} \quad (5.21)$$

enquanto que a função $K(x)$ é calculada da seguinte maneira

$$K(x) = \begin{cases} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sinh(\pi - 2\gamma) \frac{k}{2} e^{ikx}}{2 \sinh(\pi - \gamma) \frac{k}{2} \cosh \frac{k}{2}} dk, & 0 < \Delta \leq 1, \\ \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\gamma|k|}}{\cosh \gamma k} e^{i2kx}, & \Delta > 1. \end{cases} \quad (5.22)$$

Primeiramente vamos investigar o comportamento da TQD e do EoF em função da anisotropia Δ na ausência de campo externo ($h = 0$). Neste caso, os pontos críticos do modelo XXZ, eqs. (5.9) e (5.10), são $\Delta_{inf} = 1$ e $\Delta_1 = -1$. Para $\Delta < -1$ o sistema exhibe uma fase ferromagnética [103], ou seja, há uma quebra da simetria \mathbf{Z}_2 e um alinhamento dos spins ao longo da direção z , produzindo uma magnetização espontânea. Para $-1 < \Delta < 1$ o sistema exhibe uma fase sem *gap*¹⁷

¹⁷Para $\Delta < -1$ e $\Delta > 1$ existe um *gap* de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado. Este *gap* tende a zero para $-1 < \Delta < 1$.

com uma ordem de *quase* longo alcance¹⁸. Além disso, nesta fase, as simetrias do Hamiltoniano são preservadas [103]. Uma fase anti-ferromagnética é obtida para $\Delta > 1$, onde observa-se a quebra das simetrias \mathbf{Z}_2 e de translação [103]. Para $h = 0$, tanto o EoF quanto a TQD podem ser calculadas analiticamente. O EoF do operador densidade (5.11) é dado pela equação (2.14), onde:

$$C = \max \{0, |\langle \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \rangle| - |1 + \langle \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_2^z \rangle|/2\}, \quad (5.23)$$

é a Concorrência. Como o operador densidade (5.11) possui a forma X com $\rho_{11} = \rho_{44}$ e $\rho_{22} = \rho_{33}$, podemos utilizar o resultado obtido por S. Luo [72] e assim determinar a TQD em termos da função $g(f) = f \log_2 f$:

$$\begin{aligned} TQD &= \frac{1}{4}[g(1 - 2d_x - d_z) + 2g(1 + d_z) + g(1 + 2d_x - d_z)] \\ &\quad - \frac{1}{2}[g(1 + D_m) + g(1 - D_m)], \end{aligned} \quad (5.24)$$

onde $d_x = \langle \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \rangle$ e $d_z = \langle \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_2^z \rangle$. O parâmetro D_m corresponde ao processo de escolha dos projetores no cálculo da Discórdia Quântica:

$$D_m = \max \{|\langle \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \rangle|, |\langle \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_2^z \rangle|\}. \quad (5.25)$$

Nosso primeiro resultado encontra-se na Figura (5.7), onde aparecem os gráficos da TQD e do EoF em função do parâmetro Δ para o modelo XXZ no limite termodinâmico com $h = 0$ e para diferentes valores de kT . Observa-se que para $T = 0K$ tanto o EoF quanto a TQD apresentam um máximo global no ponto crítico $\Delta_{inf} = 1$. Entretanto, além de assumir um valor máximo, a TQD sofre uma mudança súbita neste ponto, devido a uma mudança na função que maximiza a equação (5.25). Para $-1 < \Delta < 1$ tem-se $D_m = |\langle \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \rangle|$ enquanto que para $\Delta > 1$ a função D_m assume o valor $|\langle \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_2^z \rangle|$. Esta mudança súbita da TQD também é observada no ponto crítico $\Delta_1 = -1$, onde a TQD torna-se descontínua. O EoF, por outro lado, destaca a transição em Δ_1 de maneira diferente, exibindo um crescimento repentino, mas suave, a partir de $\Delta > -1$. Agora, conforme a temperatura aumenta, o ponto de máximo do EoF se desloca para a direita, assim como o primeiro valor de Δ tal que $EoF > 0$,

¹⁸Neste caso, as correlações decaem como uma lei de potência: $\langle \hat{\sigma}_i^k \hat{\sigma}_{i+r}^k \rangle \sim r^{-a}$, onde r denota a distância entre dois spins.

impossibilitando a caracterização dos dois pontos críticos. Porém, o mesmo não ocorre com a TQD. As duas mudanças súbitas continuam ocorrendo nos pontos críticos e o máximo global não sofre nenhum deslocamento. Portanto, para $T > 0$ as duas TFQ's são assinaladas por uma descontinuidade na primeira derivada da TQD. Na Figura (5.8) nós calculamos algumas grandezas termodinâmicas em função do parâmetro¹⁹ $\Delta > 0$. Como demonstrado nesta Figura, a única grandeza que consegue detectar o ponto crítico $\Delta_{inf} = 1$ é a Susceptibilidade Magnética (descontínua em Δ_{inf}), mas apenas para $T = 0K$, como observado anteriormente por C. N. Yang e C. P. Yang [127]. Portanto, para $T > 0$ apenas a TQD está apta a caracterizar este ponto crítico.

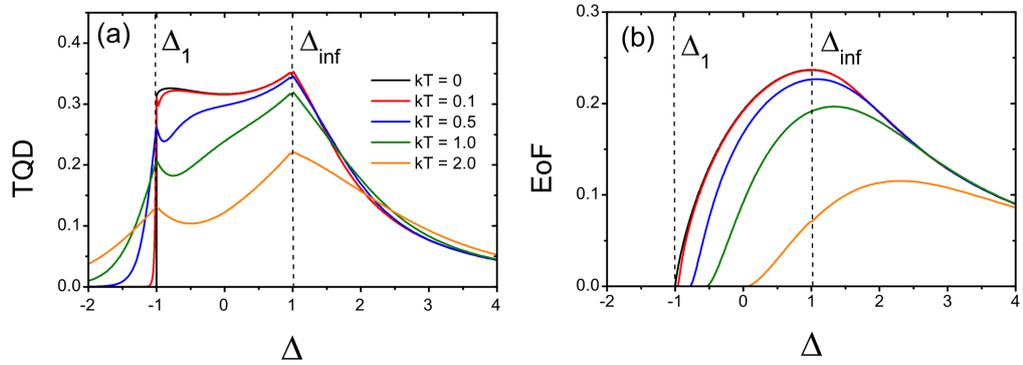


FIGURA 5.7: (a) TQD e (b) EoF em função do parâmetro Δ para o modelo XXZ no limite termodinâmico com $h = 0$ e diferentes valores de kT . Os valores de kT utilizados foram: $kT = 0$ (linha preta), 0.1 (linha vermelha), 0.5 (linha azul), 1.0 (linha verde), 2.0 (linha laranja). Estas curvas podem ser organizadas da seguinte forma: de cima para baixo, na região $-1 < \Delta < 1$, $kT = 0, 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$. As linhas verticais tracejadas indicam os pontos críticos $\Delta_{inf} = 1$ e $\Delta_1 = -1$.

O efeito da ação do campo externo h , descrito pelas eqs. (5.9) e (5.10), é deslocar os pontos críticos $\Delta = -1$ e $\Delta = 1$ para a direita. Para estudar o comportamento das correlações quânticas sob a ação do campo externo vamos considerar três valores de h : 2.0, 6.0, 12.0. Os pontos críticos para estes valores de h estão expostos na Tabela (5.1). Os gráficos da TQD e do EoF em função do parâmetro Δ para $T = 0K$ e diferentes valores de h ($= 2, 6, 12$) encontram-se na Figura (5.9).

¹⁹Estamos considerando apenas $\Delta > 0$, pois para $\Delta < 0$ surgem dificuldades técnicas envolvendo o cálculo numérico.

	$h = 2$	$h = 6$	$h = 12$
Δ_1 (primeira-ordem)	-0.50	0.50	2.00
Δ_2 (segunda-ordem)	2.15	3.30	4.88

TABELA 5.1: Pontos Críticos associados as TFQ de primeira-ordem (Δ_1) e segunda-ordem (Δ_2) do modelo XXZ no limite termodinâmico para diferentes valores do campo externo h .

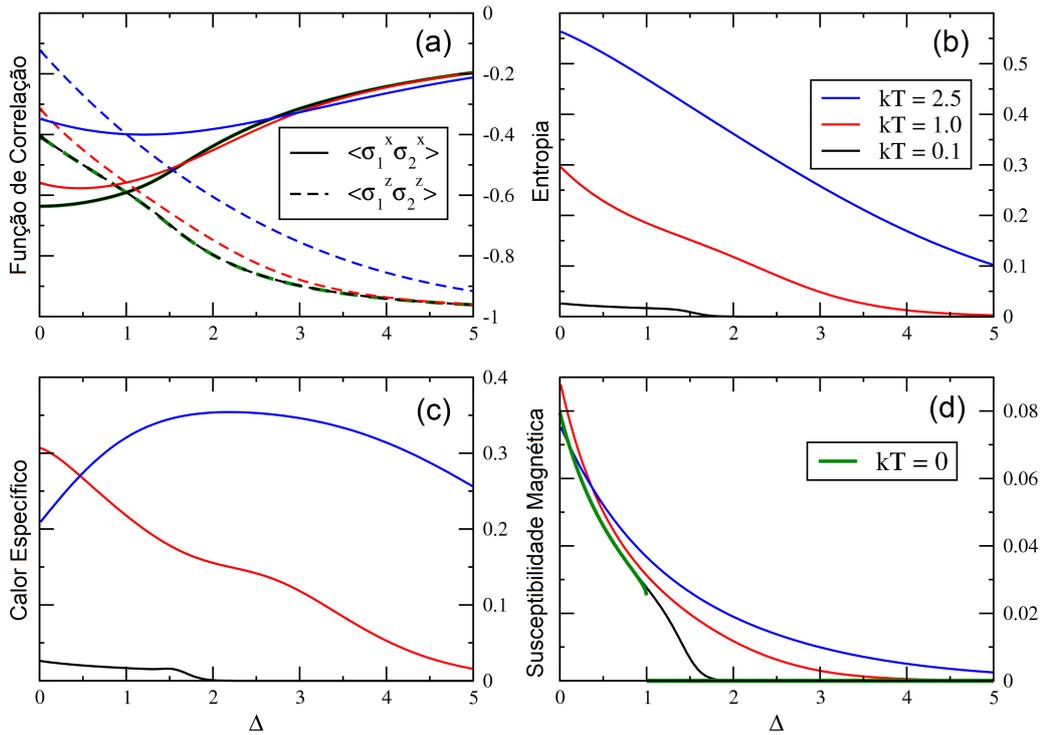


FIGURA 5.8: (a) Funções de Correlação, (b) Entropia, (c) Calor Específico e (d) Susceptibilidade Magnética em função do parâmetro Δ para o modelo XXZ no limite termodinâmico com $h = 0$ e diferentes temperaturas. Os valores de kT utilizados foram: $kT = 0$ (linha verde), 0.1 (linha preta), 0.5 (linha azul), 1.0 (linha vermelha), 2.5 (linha azul). As curvas das Funções de Correlação referentes a $kT = 0$ e $kT = 0.1$ são indistinguíveis.

Para $h = 0$ constatamos a existência de um máximo global no ponto crítico Δ_{inf} , associado a TQD e ao EoF no regime de temperatura nula. No entanto, para $h > 0$ nota-se na Figura (5.9) que o máximo global não está mais associado com nenhum dos dois pontos críticos. Embora o ponto crítico Δ_2 não seja indicado por um máximo ou mínimo global das correlações quânticas (TQD ou EoF), note que este ponto é muito bem caracterizado por uma descontinuidade na primeira derivada das correlações quânticas (TQD ou EoF). No caso da TFQ de primeira-ordem para $h > 0$, o ponto crítico Δ_1 é determinado da mesma maneira tanto pela TQD quanto pelo EoF: ambas medidas são nulas para $\Delta < \Delta_1$ e diferentes de zero para $\Delta > \Delta_1$. Em $\Delta = \Delta_1$ a primeira derivada das correlações quânticas (TQD ou EoF) exibe uma divergência. Entre os dois pontos críticos existe um máximo global do EoF e da TQD que, no ponto de máximo, sofre uma mudança súbita²⁰. Entretanto, este ponto de máximo não está relacionado com nenhuma TFQ conhecida ou com algum comportamento físico específico. Portanto, uma mudança súbita da TQD não fornece uma condição suficiente para assegurar a existência de uma TFQ. Dessa forma, uma questão importante, que será abordada em trabalhos futuros, consiste em compreender quando uma mudança súbita está associada a um ponto crítico quântico.

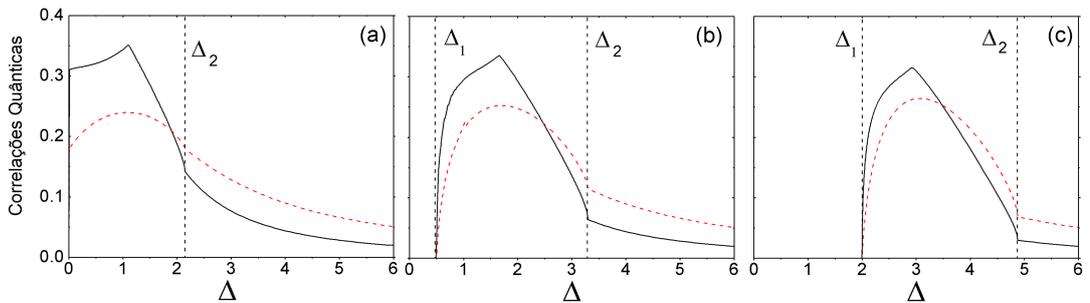


FIGURA 5.9: TQD (linha solid/preta) e EoF (linha tracejada/vermelha) em função do parâmetro Δ para o modelo XXZ no limite termodinâmico com $h \neq 0$ e $T = 0K$. Os valores de h utilizados foram: (a) $h = 2$, (b) $h = 6$, (c) $h = 12$.

Os efeitos da temperatura no caso $h > 0$ estão contemplados nas Figuras (5.10) e (5.11). Em ambas figuras consideramos a dependência das correlações

²⁰Novamente associada com a troca dos projetores que minimizam a entropia condicional quântica (2.30)

quânticas (TQD e EoF) com relação ao parâmetro Δ para diferentes temperaturas. Na Fig. (5.10) utilizamos $h = 6$ enquanto que na Fig. (5.11) fixamos $h = 12$. Nota-se que conforme a temperatura aumenta o máximo da TQD/EoF diminui e o bico em Δ_2 é suavizado. Além disso, para $T > 0$ as correlações quânticas assumem valores positivos na vizinhança de Δ_1 . Logo, a caracterização deste ponto crítico através da observação de duas regiões distintas, uma com EoF > 0 e outra com EoF < 0 , é perdida. Embora no caso $h = 0$ a TQD e o EoF não apresentavam comportamentos semelhantes, principalmente para $T > 0$, a adição de um campo externo ao modelo XXZ faz com que estas duas medidas de correlações quânticas desenvolvam comportamentos muito parecidos. Além disso, diferente do caso $h = 0$, algumas funções Termodinâmicas também podem ser utilizadas para detectar os pontos críticos no regime de baixas temperaturas quando $h > 0$, como mostrado na Figura (5.12). Neste cenário surge a seguinte questão: ainda existe alguma vantagem no uso da TQD ao invés do EoF na tentativa de estimar os pontos críticos? Para responder esta questão vamos inicialmente determinar um critério para calcular os pontos críticos no regime de temperaturas finitas.

As derivadas das correlações quânticas (EoF e TQD) exibem não-analiticidades, divergências ou descontinuidades, no regime de temperatura nula. Um aumento na temperatura do sistema implica numa suavização das curvas associadas às correlações quânticas, inibindo o aparecimento de não-analiticidades nas suas derivadas. Entretanto, se a temperatura do sistema for suficientemente baixa, ainda é possível observar alguma evidência desta não-analiticidade produzida em $T = 0K$. Este argumento é ilustrado na Figura (5.13), onde calculamos as derivadas de primeira e segunda-ordem da TQD em função de Δ para diferentes temperaturas. As curvas das derivadas foram normalizadas, ou seja, cada curva foi dividida pelo valor máximo da respectiva derivada. Em $T = 0K$ uma divergência na derivada de primeira-ordem da TQD (ou EoF) caracteriza o ponto crítico Δ_1 , enquanto que o ponto crítico Δ_2 está associado a uma divergência na derivada de segunda-ordem. Como observado na Figura (5.13), embora as divergências nos pontos críticos desapareçam para $T > 0$, as derivadas atingem seus valores máximos nas vizinhanças destes pontos. Estes valores máximos são utilizados

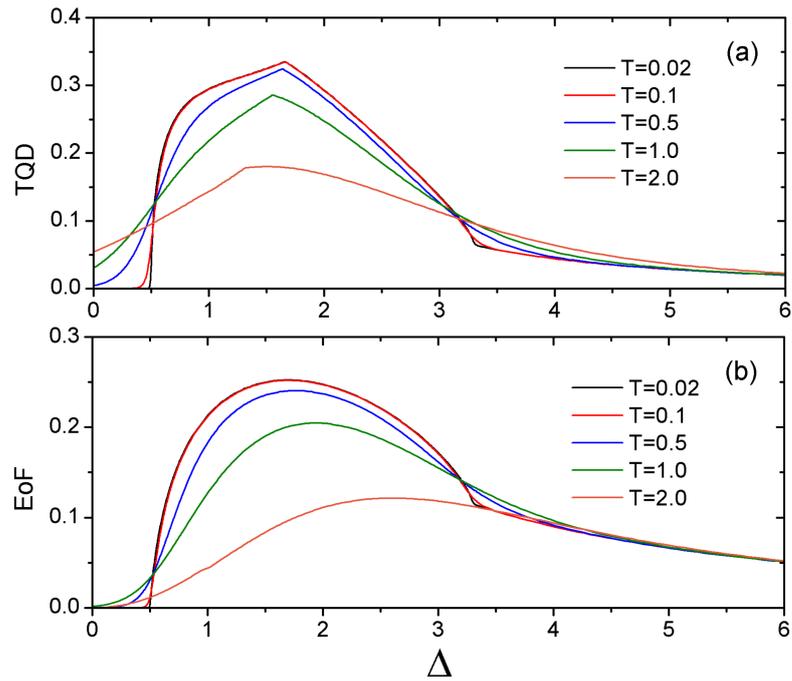


FIGURA 5.10: (a) TQD e (b) EoF em função do parâmetro Δ para o modelo XXZ no limite termodinâmico com $h = 6$ e diferentes temperaturas: $kT = 0.02, 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$, ordenadas de cima para baixo tendo como referência $\Delta \approx 2$.

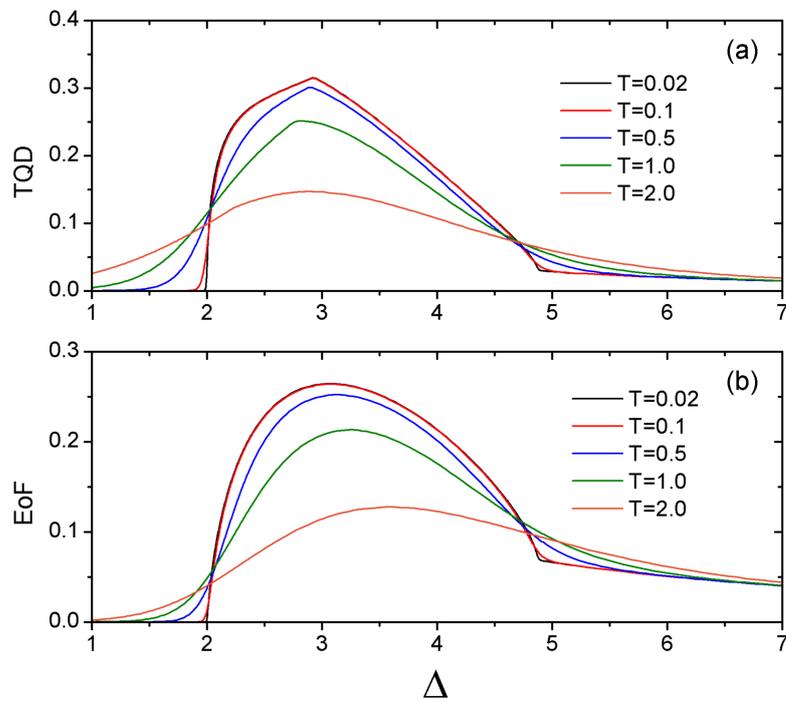


FIGURA 5.11: (a) TQD e (b) EoF em função do parâmetro Δ para o modelo XXZ no limite termodinâmico com $h = 12$ e diferentes temperaturas: $kT = 0.02, 0.1, 0.5, 1.0, 2.0$, ordenadas de cima para baixo tendo como referência $\Delta \approx 3$.

para estimar os pontos críticos quando a temperatura é finita. A mesma análise pode ser aplicada se considerarmos o EoF no lugar da TQD²¹.

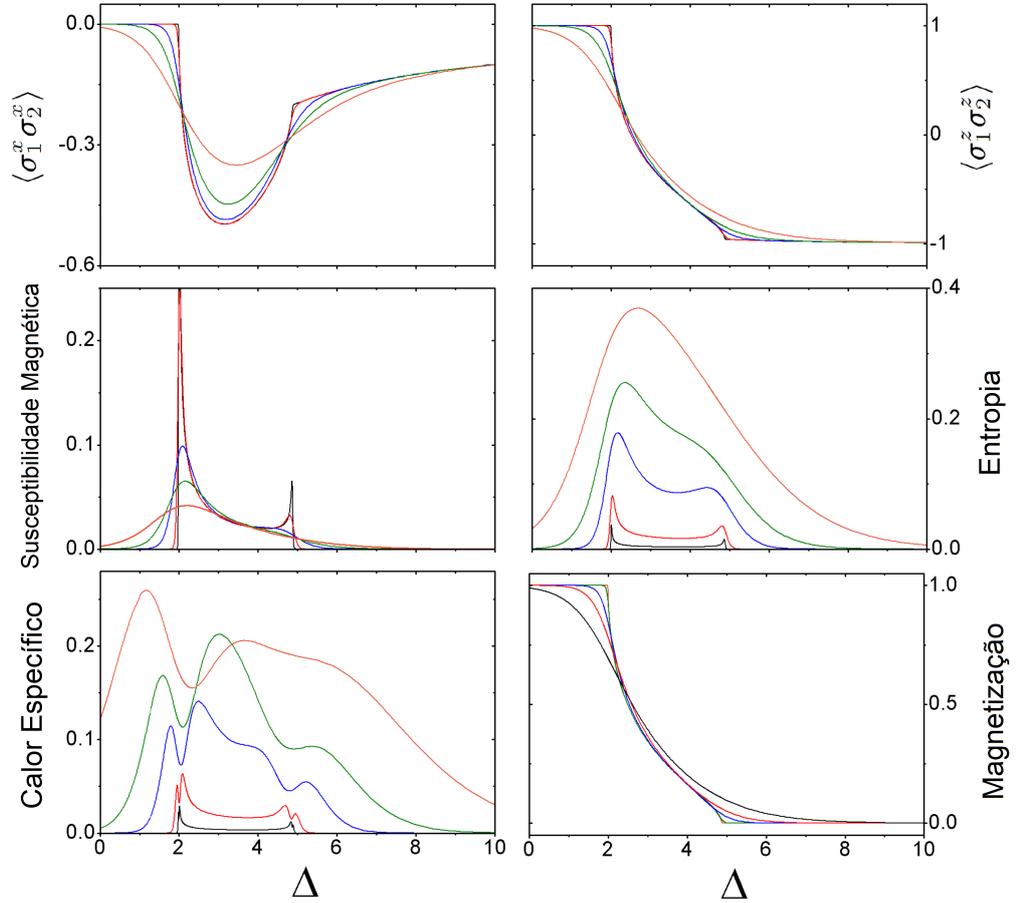


FIGURA 5.12: Funções Termodinâmicas para o modelo XXZ no limite termodinâmico com $h = 12$ e $kT = 0.02$ (linha preta), $kT = 0.1$ (linha vermelha), $kT = 0.5$ (linha azul), $kT = 1.0$ (linha verde), e $kT = 2.0$ (linha laranja). A temperatura nas curvas da magnetização e das funções de correlação, $\langle \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \rangle$ e $\langle \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_2^z \rangle$, está ordenada de cima para baixo na região com $\Delta < 1$, enquanto que nas demais curvas o ordenamento ocorre no sentido contrário.

Embora a TQD não seja a única grandeza capaz de assinalar as TFQ do modelo XXZ com $h > 0$, mesmo para T finita, ela fornece a melhor estimativa dos pontos críticos entre as grandezas testadas. Este fato é constatado analisado a Figura (5.14), onde comparamos a diferença entre o valor correto do ponto crítico Δ_c e o valor estimado através do nosso método Δ_e , para $h = 6$ e $h = 12$. Conforme aumentamos a temperatura essa diferença aumenta mas, mesmo para $kT \approx 1.0$, o valor do ponto crítico estimado pela TQD apresenta uma

²¹Utilizamos este mesmo procedimento para estimar os pontos críticos através das funções de correlação $\langle \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \rangle$ e $\langle \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_2^z \rangle$.

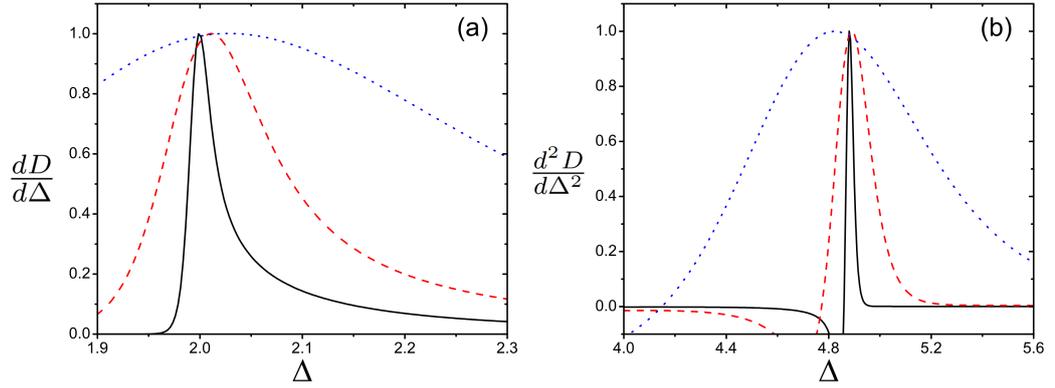


FIGURA 5.13: (a) Derivada de primeira-ordem e (b) de segunda-ordem da TQD em função do parâmetro Δ para o modelo XXZ no limite termodinâmico com $h = 12$ e $kT = 0.02$ (linha sólida), $kT = 0.1$ (linha tracejada), e $kT = 0.5$ (linha pontilhada). As derivadas calculadas aqui foram normalizadas, ou seja, cada curva foi dividida pelo valor máximo da respectiva derivada. Os máximos das derivadas de primeira-ordem e de segunda-ordem estão muito próximos dos pontos críticos $\Delta_1 = 2$ e $\Delta_2 \approx 4.88$, respectivamente.

boa concordância com o valor correto. No caso das TFQ's de primeira-ordem, Figs. (5.14a) e (5.14c), o EoF apresenta a pior estimativa, enquanto que nas TFQ's de segunda-ordem, Figs. (5.14b) e (5.14d), este papel é desempenhado pela função de correlação $\langle \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \rangle$. Embora possamos utilizar essa abordagem para estimar os pontos críticos para temperaturas próximas a $T = 0K$, para temperaturas muito altas as assinaturas das não-analiticidades em $T = 0K$ tornam-se menos evidentes. Enquanto que para $T \approx 0K$ os pontos extremos das derivadas das correlações quânticas destacam-se nas vizinhanças dos pontos críticos, para temperaturas elevadas os máximos/mínimos locais não aparecem de maneira efetiva, logo não há como afirmar que este máximo/mínimo está associado a um ponto crítico.

Para finalizar esta seção calculamos as correlações quânticas em função da temperatura absoluta kT para $h = 0$ e diferentes valores de Δ . A Figura (5.15) mostra que o EoF tende a desaparecer subitamente a medida que a temperatura cresce, enquanto que a TQD anula-se apenas no limite de $T \rightarrow \infty$. Este desaparecimento súbito pode ser retardado aumentando o valor de Δ . Os *insets* na Figura (5.15) destacam o *regrowth* das correlações quânticas com a temperatura. Como visto na seção anterior, apenas a TQD exibiu este comportamento no

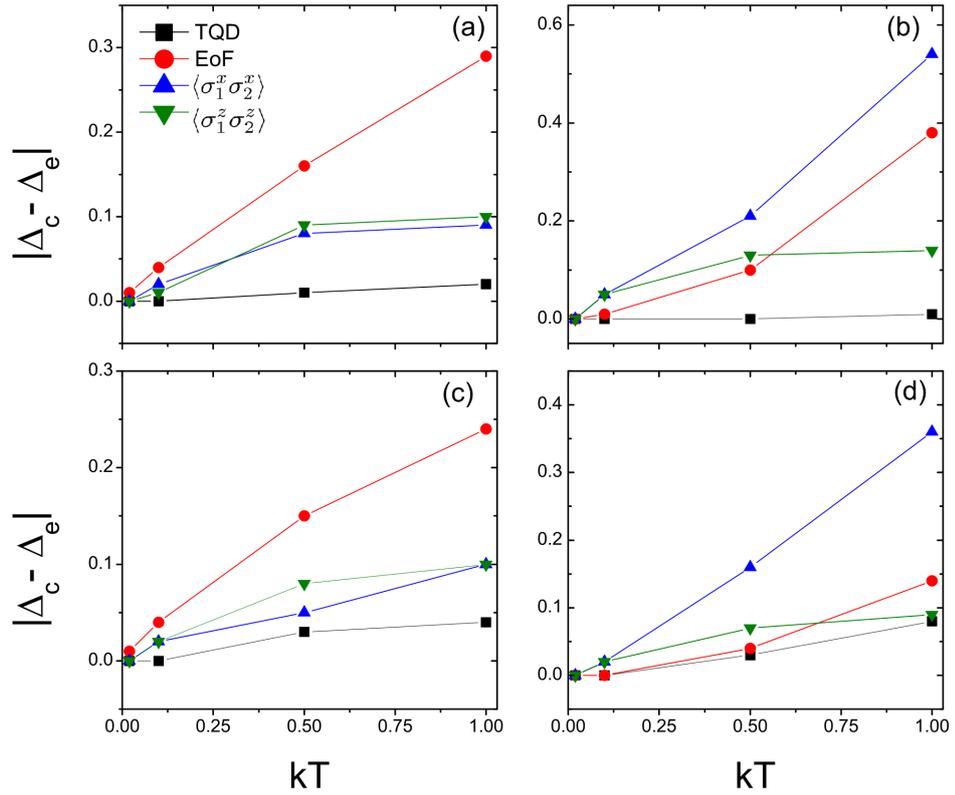


FIGURA 5.14: A diferença entre o valor correto do ponto crítico Δ_c e o valor estimado Δ_e pela TQD (quadrado), EoF (círculo), $\langle \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \rangle$ (seta para cima), e $\langle \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_2^z \rangle$ (seta para baixo) em função da temperatura absoluta kT para $h = 6$ [(a) e (b)] e $h = 12$ [(c) e (d)]. Em (a) e (c) tem-se os pontos críticos das TFQ's de primeira-ordem, enquanto que em (b) e (d) tem-se os pontos críticos das TFQ's de segunda-ordem.

caso de dois spins interagentes. No entanto, este resultado mostra que no limite termodinâmico, o EoF também pode apresentar um *regrowth*. Note também que para $\Delta \leq 1$ (linhas sólidas) a TQD e o EoF aumentam conforme Δ cresce. Por outro lado, para $\Delta > 1$ (linhas tracejadas) isso só acontece com o EoF, a partir de um certo valor kT .

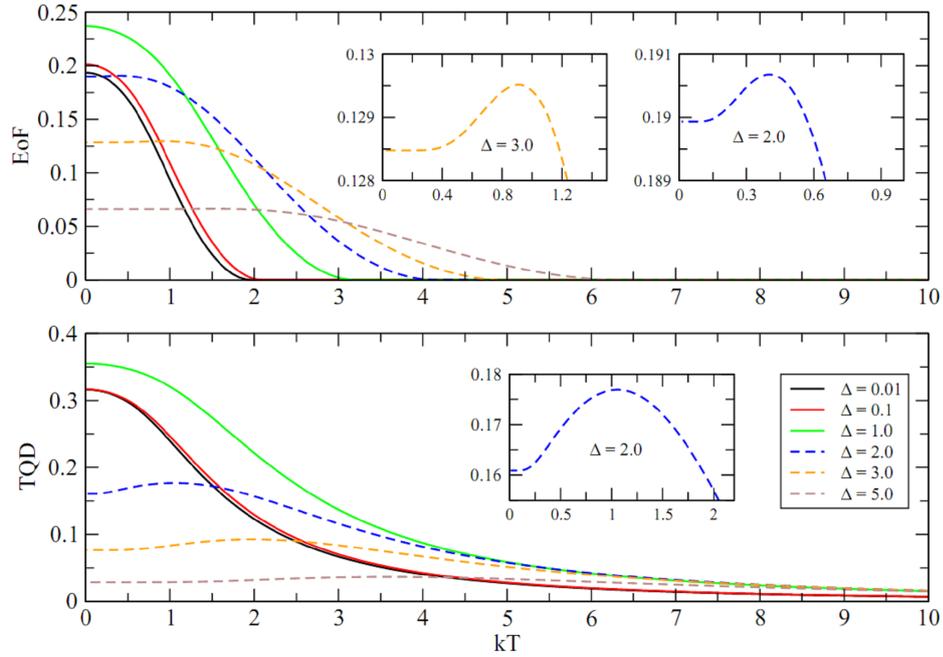


FIGURA 5.15: TQD (painel inferior) e EoF (painel superior) em função da temperatura absoluta kT para $h = 0$ e diferentes valores de Δ . Os *insets* mostram o *regrowth* da TQD e do EoF.

5.4 Modelo XY

Nesta seção vamos estudar o comportamento das correlações quânticas no modelo XY unidimensional na presença de um campo magnético transverso, dado pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H_{xy} = -\frac{\lambda}{2} \sum_{j=1}^N [(1 + \gamma) \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x + (1 - \gamma) \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y] - \sum_{j=1}^N \hat{\sigma}_j^z, \quad (5.26)$$

onde λ determina o inverso do campo magnético transverso e γ o grau de anisotropia ($0 \leq \gamma \leq 1$). Assumimos novamente condições de contorno periódicas, $\hat{\sigma}_{N+1}^\alpha = \hat{\sigma}_1^\alpha$. O modelo de Ising no campo transverso é obtido para $\gamma = \pm 1$,

enquanto que $\gamma = 0$ corresponde ao modelo XX no campo transversal [128–130]. O modelo XY sofre uma TFQ de segunda-ordem no ponto crítico $\lambda_c = 1$, que separa as fases ferromagnética e paramagnética. Outra TFQ de segunda-ordem é observada para $\lambda > 1$ no ponto crítico $\gamma_c = 0$ [128–131]. Esta transição é obtida variando o parâmetro γ e separa duas fases ferromagnéticas: uma ordenada ao longo da direção x e outra ao longo da direção y . Embora estas duas transições possuam a mesma ordem, elas pertencem a distintas classes de universalidade [128–131].

A transição entre as fases paramagnética e ferromagnética pode ser ilustrada através do modelo de Ising ($\gamma = 1$) [88]. Para $\lambda \rightarrow 0$ o estado fundamental será $|0\rangle = \prod_i |\uparrow\rangle_i$, onde $|\uparrow\rangle_i$ é o auto-estado do operador $\hat{\sigma}_i^z$ com auto-valor positivo. Como $|\uparrow\rangle_i = (|\rightarrow\rangle_i + |\leftarrow\rangle_i)/\sqrt{2}$, onde $|\rightarrow\rangle_i$ e $|\leftarrow\rangle_i$ são auto-estados de $\hat{\sigma}_i^x$, tem-se que $\langle 0 | \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_j^x | 0 \rangle = \delta_{ij}$. Logo, os valores de $\hat{\sigma}_i^x$ para sítios diferentes são descorrelacionados. Entretanto, correções de ordem λ tendem a alinhar os spins próximos na direção x , gerando correlações. No entanto, estas correlações são de curto alcance mesmo para valores grandes de λ . Por outro lado, no limite oposto, $\lambda \gg 1$, o estado fundamental é duplamente degenerado, ou seja, os spins estão alinhados em uma das duas direções de x : $|\rightarrow 0\rangle = \prod_i |\rightarrow\rangle_i$ ou $|\leftarrow 0\rangle = \prod_i |\leftarrow\rangle_i$. Conforme adicionamos um campo magnético na direção transversal, alguns dos spins serão invertidos. No entanto, como o Hamiltoniano (5.26) apresenta a simetria \mathbf{Z}_2 , a ação deste campo não levará a uma quebra da degenerescência, mesmo no limite termodinâmico [89]. Portanto, os estados fundamentais nos limites $\lambda \gg 1$ e $\lambda \rightarrow 0$ possuem características distintas, indicando que deve haver uma transição de fase entre eles para algum valor de λ .

O Hamiltoniano (5.26) admite uma solução exata no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ [129; 130]. O ponto crucial para se determinar esta solução consiste em mapear os graus de liberdade de spin 1/2 em férmions sem spin. Este procedimento é conhecido como transformação de Jordan-Wigner. Desta forma, uma cadeia de spins com um spin 1/2 por sítio pode ser tratada como um sistema de férmions sem spins transicionando entre os sítios, onde o spin para cima representa um sítio ocupado e o spin para baixo um sítio desocupado. O hamiltoniano resultante desta transformação é diagonalizado através das transformadas de

Fourier e Bogoliubov [129; 130]. Além da diagonalização do modelo XY, é possível obter também a magnetização e as funções de correlação [129; 130]. No que segue apresentamos o operador densidade reduzido $\rho_{i,j}$, referente aos sítios i e j . Devido à invariância translacional, este operador densidade depende apenas da distância $k = |j - i|$ entre os sítios, ou seja, $\rho_{i,j} = \rho_{0,k}$. Portanto, o operador densidade $\rho_{0,k}$ para o modelo XY em equilíbrio térmico é dado por [24]:

$$\rho_{0,k} = \frac{1}{4} \left[I_{0,k} + \langle \sigma^z \rangle (\sigma_0^z + \sigma_k^z) + \sum_{\alpha=x,y,z} \langle \sigma_0^\alpha \sigma_k^\alpha \rangle \sigma_0^\alpha \sigma_k^\alpha \right],$$

onde $I_{0,k}$ é a matriz identidade de dimensão 4×4 . A magnetização transversa $\langle \sigma_k^z \rangle = \langle \sigma^z \rangle$ é

$$\langle \sigma^z \rangle = - \int_0^\pi (1 + \lambda \cos \phi) \tanh(\beta \omega_\phi) \frac{d\phi}{2\pi \omega_\phi}, \quad (5.27)$$

com $\omega_\phi = \sqrt{(\gamma \lambda \sin \phi)^2 + (1 + \lambda \cos \phi)^2}/2$. As funções de correlação são determinadas pelas expressões:

$$\langle \sigma_0^x \sigma_k^x \rangle = \begin{vmatrix} G_{-1} & G_{-2} & \cdots & G_{-k} \\ G_0 & G_{-1} & \cdots & G_{-k+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{k-2} & G_{k-3} & \cdots & G_{-1} \end{vmatrix}, \quad (5.28)$$

$$\langle \sigma_0^y \sigma_k^y \rangle = \begin{vmatrix} G_1 & G_0 & \cdots & G_{-k+2} \\ G_2 & G_1 & \cdots & G_{-k+3} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_k & G_{k-1} & \cdots & G_1 \end{vmatrix}, \quad (5.29)$$

$$\langle \sigma_0^z \sigma_k^z \rangle = \langle \sigma^z \rangle^2 - G_k G_{-k}, \quad (5.30)$$

com

$$G_k = \int_0^\pi \tanh(\beta \omega_\phi) \cos(k\phi) (1 + \lambda \cos \phi) \frac{d\phi}{2\pi \omega_\phi} - \gamma \lambda \int_0^\pi \tanh(\beta \omega_\phi) \sin(k\phi) \sin \phi \frac{d\phi}{2\pi \omega_\phi}.$$

Tanto o EoF quanto a TQD são capazes de detectar os pontos críticos deste modelo para $T = 0K$, como observado na Ref. [107]. Neste trabalho os autores calcularam a TQD e o EoF para diferentes valores de k (a distância

entre dois spins), mostrando que a TQD é capaz de assinalar o ponto crítico inclusive para $k = 3$ e $k = 4$, quando nem sempre é possível utilizar o EoF para detectar a TFQ. Os autores apresentaram também alguns resultados com relação ao comportamento das correlações quânticas para $T > 0$, mas não analisaram o papel destas quantidades na detecção dos pontos críticos. Nas Figuras (5.16) e (5.17), são apresentados os gráficos da TQD e do EoF para primeiros e segundos vizinhos, respectivamente, em função do parâmetro λ , para $kT = 0.01, 0.1, 0.5$ e $\gamma = 0, 0.5, 1.0$. Primeiro, observe que a TQD é mais robusta que o EoF com respeito aos efeitos térmicos. Por exemplo, para $kT = 0.5$ o valor do EoF entre primeiros vizinhos é zero ou muito próximo de zero para quase²² todos os valores de γ testados, enquanto que a TQD é sempre diferente de zero. Para segundos vizinhos a situação é mais drástica, o EoF é sempre igual a zero para $kT = 0.5$. Como discutido ao longo da Tese, este resultado mostra também a diferença entre os comportamentos do EoF e da TQD, principalmente para $\gamma = 0.5$.

As TFQ apresentadas pelo modelo XY são transições de segunda ordem, logo o ponto crítico em $T = 0K$ é caracterizado por uma divergência ou descontinuidade na primeira derivada da TQD ou do EoF [26; 98]. Ainda, se a primeira derivada é descontínua, então o ponto crítico é detectado também por uma divergência na segunda derivada. Dessa forma, podemos adotar a mesma estratégia da seção anterior para investigar a habilidade das correlações quânticas na detecção dos pontos críticos do modelo XY no regime de temperaturas finitas. Em outras palavras, se a primeira derivada da TQD/EoF é divergente em $T = 0K$, então o ponto crítico é obtido analisando os máximos/mínimos locais da TQD/EoF para $T > 0$; se a primeira derivada é descontínua, então podemos analisar os máximos/mínimos locais da segunda derivada. Os resultados obtidos através desta análise estão expostos na Figura (5.18), contendo os gráficos dos pontos críticos estimados através da TDQ (quadrados pretos) e do EoF (círculos vermelhos) para primeiros e segundos vizinhos em função de kT para $\gamma = 0, 0.5$, e 1.0 . Note que nesta figura estamos considerando apenas a TFQ obtida devido a variação do parâmetro λ , ou seja, a transição que ocorre no ponto crítico $\lambda_c = 1$.

²²Este comportamento foi observado para outros valores de γ além daqueles apresentados na Figura (5.16).

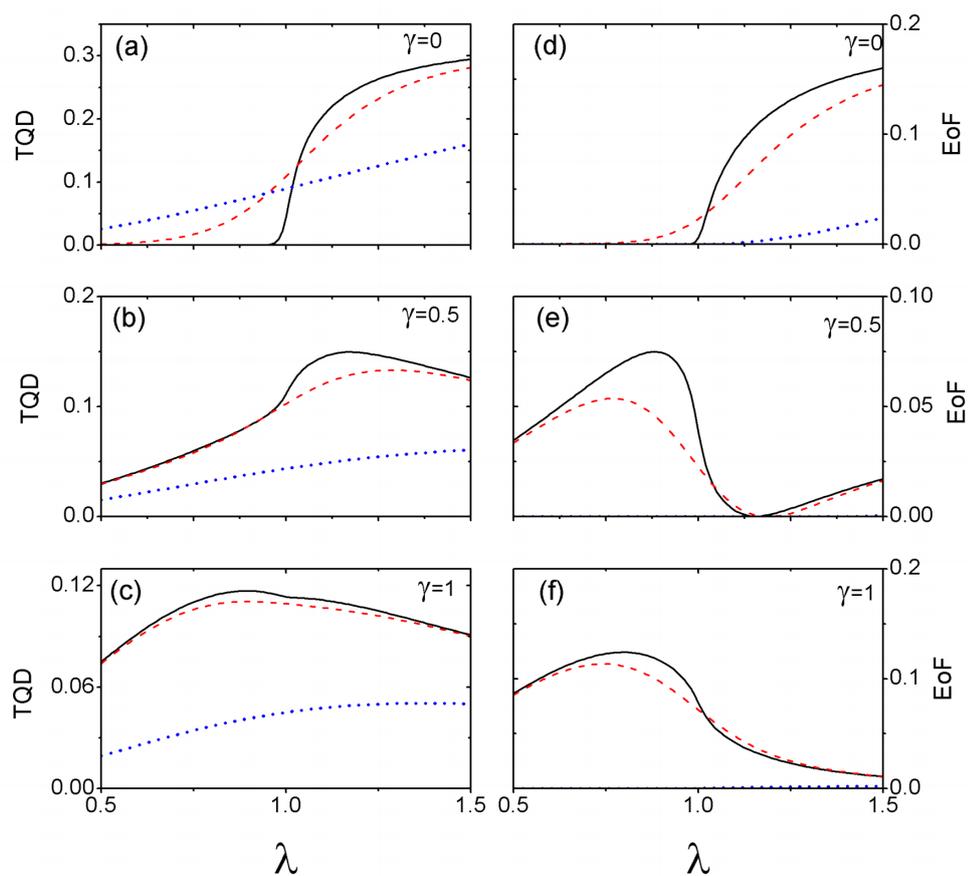


FIGURA 5.16: (a)-(c) TQD e (d)-(f) EoF função do parâmetro λ para $kT = 0.01$ (linha preta/sólida), $kT = 0.1$ (linha vermelha/tracejada), e $kT = 0.5$ (linha azul/pontilhada) entre primeiros vizinhos. Os valores de γ estão indicados nos gráficos.

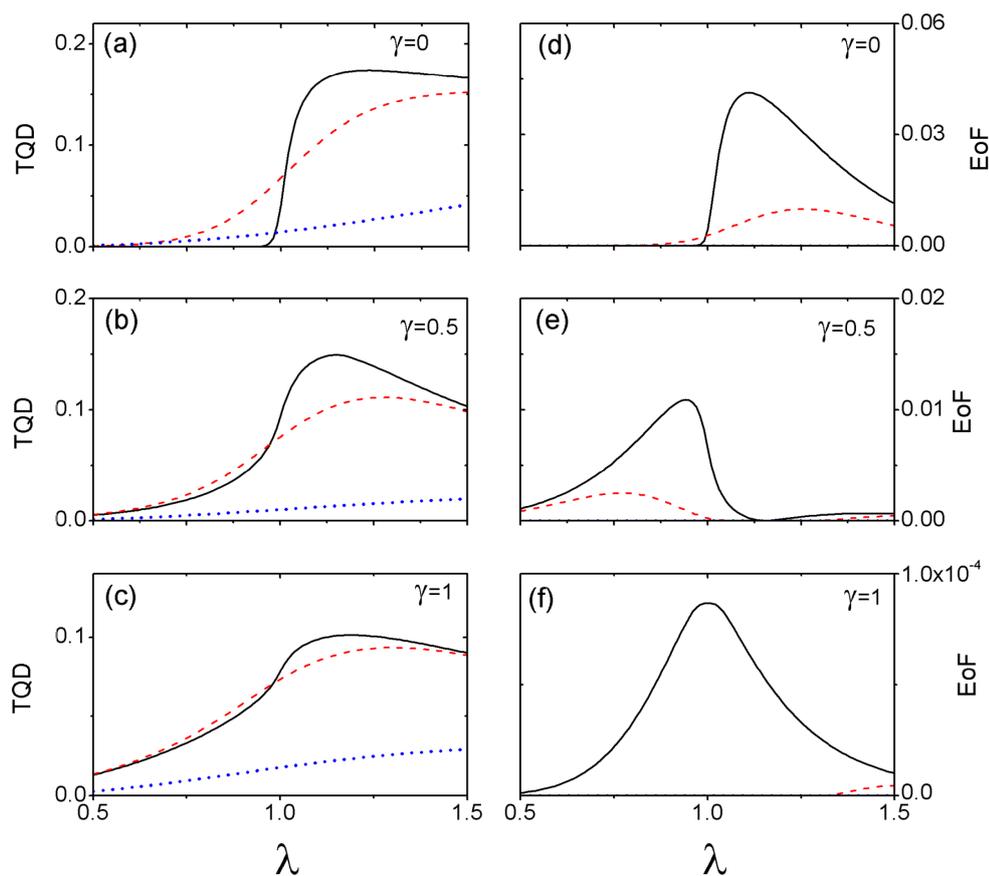


FIGURA 5.17: (a)-(c) TQD e (d)-(f) EoF função do parâmetro λ para $kT = 0.01$ (linha preta/sólida), $kT = 0.1$ (linha vermelha/tracejada), e $kT = 0.5$ (linha azul/pontilhada) entre segundos vizinhos. Os valores de γ estão indicados nos gráficos.

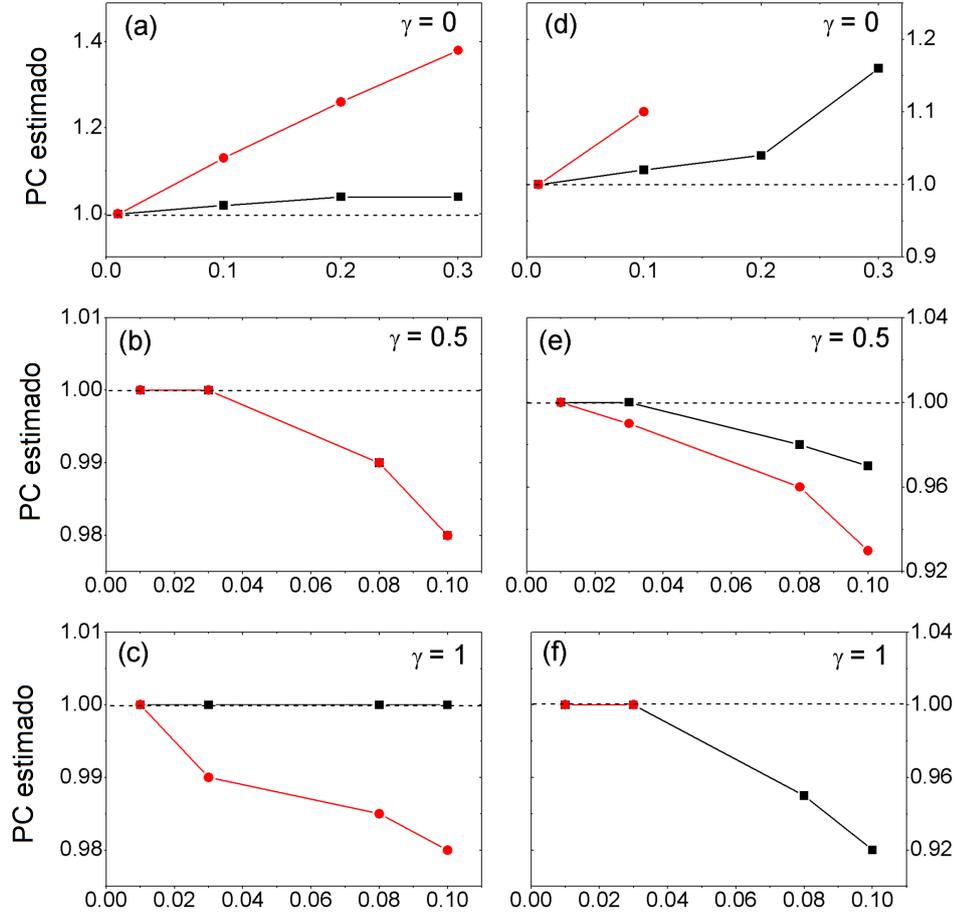


FIGURA 5.18: Pontos críticos (PC) estimados através da TDQ (quadrados pretos) e do EoF (círculos vermelhos) para (a)-(c) primeiros e (d)-(f) segundos vizinhos em função de kT para $\gamma = 0, 0.5$, e 1.0 . A linha tracejada indica o valor correto do ponto crítico, $\lambda_c = 1$. Utilizou-se os seguintes valores de γ : $0, 0.5$, e 1.0 (indicados nos gráficos). No painel (b), os valores dos pontos críticos estimados pela TDQ e pelo EoF coincidem. Nos painéis (d) e (f) existem apenas dois pontos estimados pelo EoF, pois para valores superiores de kT tem-se $EoF(\rho_{0,2}) = 0$.

Como constatado na Figura (5.18), quando comparada com o EoF, a TDQ apresenta-se como a melhor alternativa para estimar o ponto crítico $\lambda_c = 1$ para temperaturas finitas. Enquanto que para $\gamma = 0.5$ e $\gamma = 0.1$ a TDQ calculada para primeiros vizinhos fornece um valor para λ_c apenas um pouco melhor do que aquele obtido através do EoF, para $\gamma = 0$ o resultado da TDQ é significativamente melhor. Além disso, note que para $\gamma = 0$ o ponto crítico pode ser estimado para valores de temperatura superiores àqueles obtidos para $\gamma = 0.5$ e $\gamma = 1.0$. Quando olhamos para as correlações quânticas calculadas para segundo vizinhos, observa-

se que a TQD continua sendo mais vantajosa do que o EoF. Em particular, para $\gamma = 1$ o EoF é útil apenas para temperaturas muito baixas, enquanto que a TQD consegue uma estimativa relativamente boa para temperaturas maiores. No entanto, segundo a seção anterior, para o modelo XXZ foi possível estimar os pontos críticos, com boa precisão, para temperaturas superiores aquelas utilizadas na Fig. (5.18). A justificativa para esta diferença não foi obtida até então, sendo portanto uma questão importante a ser trabalhada futuramente. Uma possível diferença poderia estar associada a ordem das TFQ. No caso do modelo XXZ as transições são de primeira ordem ou de ordem infinita no caso $h = 0$, por exemplo, enquanto que a transição do modelo XY em $\lambda_c = 1$ é de segunda ordem. Entretanto, o próximo resultado mostra que esta diferença não fornece, aparentemente, uma justificativa. Como discutido acima, para $\lambda > 1$ o modelo XY exibe uma TFQ de segunda em $\gamma_c = 0$. Para estudar o comportamento das correlações quânticas neste caso, adotamos $\lambda = 1.5$. Na Figura (5.19) encontram-se os gráficos da TQD e do EoF para primeiros e segundos vizinhos em função do parâmetro γ para diferentes valores de kT .

Observa-se na Figura (5.19) que tanto a TQD quanto o EoF para primeiros e segundos vizinhos atingem um máximo no ponto crítico $\gamma_c = 0$. Além disso, as características do comportamento em $T = 0K$ são mantidas conforme a temperatura aumenta. Note também que embora os comportamentos da TQD e do EoF sejam similares, apenas a TQD apresenta um “bico” no ponto crítico, caracterizado por uma descontinuidade na sua primeira derivada. Como esperado, perante as análises anteriores, a TQD continua sendo mais resistente aos efeitos térmicos, estando apta a detectar o ponto crítico $\gamma_c = 0$ com grande precisão mesmo com o desaparecimento do emaranhamento. Neste caso, assim como constatado no modelo XXZ com $h = 0$, a descontinuidade da primeira derivada da TQD está associada a uma mudança nos projetores que minimizam a entropia condicional quântica (2.30).

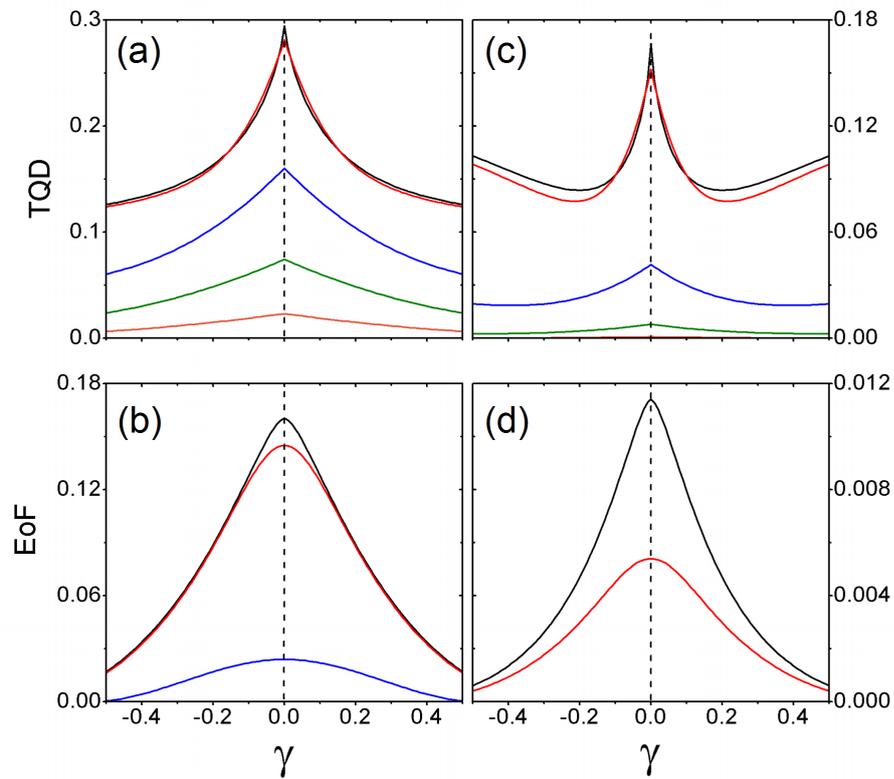


FIGURA 5.19: TDQ (painéis superiores) e do EoF (painéis inferiores) para (a)-(b) primeiros e (c)-(d) segundos vizinhos em função do parâmetro γ . Adotamos $\lambda = 1.5$. Os valores de kT utilizados (curvas ordenadas de cima para baixo) foram: 0.001, 0.1, 0.5, 1.0, e 2.0.

5.5 Considerações Finais

Os resultados presentes neste Capítulo constituem o primeiro estudo com o objetivo de investigar o comportamento das correlações quânticas (TQD e EoF) e a sua relação com as transições de fase quânticas presentes em um sistema físico que encontra-se a temperatura finita. Para tanto, adotamos dois modelos de spins conhecidos: o modelo XXZ e o modelo XY, ambos sujeitos à ação de um campo externo. Segundo os resultados obtidos para estes modelos, a Discórdia Quântica foi a grandeza que melhor estimou os pontos críticos quânticos no regime de temperatura finita. É importante ressaltar que para estimar os pontos críticos através das correlações quânticas não foi necessário conhecer o parâmetro de ordem associado a TFQ. Dessa forma, podemos utilizar os valores da Discórdia Quântica obtidos a baixas temperaturas para estimar um ponto crítico em $T = 0K$. Portanto, como resultado final deste estudo, acredito que conseguimos fornecer fortes indícios de que as correlações quânticas, principalmente a Discórdia Quântica, são uma importante ferramenta no estudo das transições de fase quânticas.

Capítulo 6

Termalização em Sistemas de Spins Interagentes

Se colocarmos um copo de café quente em cima da mesa, à medida que o tempo passa o copo começa a esfriar até que a sua temperatura se iguala à temperatura do ambiente à sua volta. Não apenas o copo de café, mas distintos sistemas físicos à nossa volta sofrem este processo de termalização¹ - a evolução para o equilíbrio térmico. Este fato cotidiano esconde um dos mais intrigantes desafios da Física Teórica: como deduzir o processo de termalização a partir das leis básicas da dinâmica, clássica ou quântica? Esta questão está intimamente ligada ao problema de relacionar uma dinâmica microscópica reversível com a aparente natureza irreversível dos fenômenos macroscópicos, o problema da *seta do tempo* [132]. Outro problema de igual importância refere-se à justificativa das hipóteses da Mecânica Estatística necessárias para a descrição do equilíbrio Termodinâmico. Em outras palavras, como justificar o uso dos *ensembles* de equilíbrio da Mecânica Estatística? Apesar destas duas questões terem sido estudadas desde o desenvolvimento da Mecânica Estatística no século 19, os mecanismos físicos subjacentes a estas questões ainda não são completamente entendidos.

No âmbito da Mecânica Estatística Clássica, evoca-se a *hipótese Ergódica*

¹Atualmente, mesmo quando um sistema físico não está em contato com um reservatório térmico, o processo que descreve a evolução para o estado de equilíbrio recebe o nome de termalização [28; 32; 33].

[36; 133; 134] para justificar o uso do *ensemble* micro-canônico na descrição do estado de equilíbrio de um sistema isolado. Essa hipótese afirma que uma trajetória no espaço de fase do sistema tem acesso a todos os microestados possíveis e que todos são igualmente acessados². Para sistemas em equilíbrio, assumir essa hipótese é equivalente a afirmar que todos os microestados são igualmente prováveis (postulado de igual probabilidades). Em alguns casos a ergodicidade é deduzida de primeiros princípios. Um dos modelos mais interessantes onde a ergodicidade é demonstrada consiste de um gás de $N \geq 2$ partículas³ colidindo elasticamente em uma caixa d -dimensional com condições de contorno periódicas [135]. Embora a hipótese Ergódica justifique o uso dos *ensembles* da Mecânica Estatística Clássica na descrição do equilíbrio, ela não fornece uma condição suficiente para garantir a evolução do sistema até o estado de equilíbrio. Uma propriedade necessária para que tal evolução ocorra chama-se *mixing* e refere-se ao fato do volume do espaço de fases se distorcer durante a evolução na tentativa de acessar o maior número possível de microestados. Para maiores detalhes consulte a Ref. [132].

O uso do *ensemble* micro-canônico na Mecânica Estatística Quântica também pode ser justificado por meio do postulado de igual probabilidade [37]. Como no caso clássico, a dedução do *ensemble* canônico de um sistema quântico S segue da interação deste com um reservatório térmico R a temperatura T , considerando o sistema composto $S + R$ isolado. Devido ao isolamento de $S + R$ pode-se utilizar o postulado de igual probabilidade para mostrar que o estado de equilíbrio do sistema S será descrito pelo *ensemble* canônico [27]. Em 2006, S. Popescu *et al.* [136] sugeriram uma justificativa alternativa para os *ensembles* da Mecânica Estatística. Eles mostram que se o estado do sistema composto $S + R$, sujeito a um vínculo V (por exemplo, a conservação de energia), for puro $|\phi\rangle$, então o estado do subsistema S , $\rho_S^V = \text{Tr}_R(|\phi\rangle\langle\phi|)$, será descrito aproximadamente pelo operador densidade $\Omega_S^V = \text{Tr}_R(\rho_{SR})$, onde ρ_{SR} é o estado de $S + R$ sujeito ao vínculo V deduzido através do postulado de igual probabilidade. Segundo os autores o resultado é válido para quase todo estado puro $|\phi\rangle$, desde

²Isso quer dizer que a trajetória permanecerá o mesmo tempo em dois sub-conjuntos do espaço de fase desde que eles tenham o mesmo volume [134].

³A partículas são representadas por esferas rígidas de mesmo raio e massas arbitrárias.

que S e R estejam emaranhados [136]. Segundo a discussão apresentada no Capítulo 2, pode-se entender o papel do emaranhamento na dedução apresentada em [136] da seguinte maneira: os postulados da Mecânica Estatística dependem da falta de conhecimento sobre o sistema que, do ponto de vista clássico, é atribuída ao observador. No caso quântico, mesmo que o estado do sistema composto seja totalmente conhecido, representado por um estado puro, se houver algum emaranhamento entre S e R , o estado do subsistema S será uma mistura estatística. Como argumentado em [137], a falta de conhecimento na Mecânica Clássica possui um caráter *subjetivo* enquanto que na Mecânica Quântica ela adquire um caráter *objetivo*.

Atualmente há um interesse crescente no estudo do processo de termalização de sistemas quânticos [28–35; 138], motivado principalmente pelo recente desenvolvimento experimental nas áreas de átomos frios [139], íons aprisionados [140], e qubits supercondutores [141]. Tais sistemas possuem um alto grau de controle experimental e oferecem um excelente *playground* para investigar questões fundamentais ligadas a Mecânica Quântica e a estatística de sistemas de muitos corpos. Um exemplo intrigante neste contexto experimental foi apresentado por T. Kinoshita *et al.* [138], onde verificou-se a *ausência* de termalização em um condensado de Bose-Einstein aprisionado em um arranjo unidimensional.

A grande maioria dos trabalhos sobre a termalização de sistemas quânticos se concentra no estudo de sistemas isolados. Embora no caso clássico a termalização de sistemas isolados seja justificada através das características não-lineares e caóticas da dinâmica clássica [132; 142], devido a natureza linear da dinâmica quântica uma abordagem análoga não pode ser empregada. Apesar da ausência da dinâmica caótica sugerir que o comportamento quântico pudesse ser menos “rico” do que o clássico, a análise de alguns sistemas quânticos tem indicado o contrário [28; 33], proporcionando diferentes maneiras de abordar o problema da termalização. Por exemplo, na abordagem empregada por M. Rigol *et al.* [28] a termalização é estudada através da análise dos valores médios dos observáveis com relação à função de onda do sistema global. Para uma dada condição inicial $|\psi(0)\rangle = \sum_j c_j |\phi_j\rangle$, $c_j = \langle \phi_j | \psi(0) \rangle$, a função de onda no tempo t é dada por $|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi(0)\rangle = \sum_j c_j e^{-iE_j t} |\phi_j\rangle$, onde E_j e $|\phi_j\rangle$ são, respectivamente, as

autoenergias e autoestados do Hamiltoniano \hat{H} . Segundo a Mecânica Quântica o valor médio de um observável \hat{O} no tempo t é

$$\langle \hat{O}(t) \rangle \equiv \langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle = \sum_{i,j} c_i^* c_j e^{-i(E_i - E_j)t} O_{ij}, \quad (6.1)$$

onde $O_{ij} = \langle \psi_i | \hat{O} | \psi_j \rangle$. Procedendo de maneira análoga ao caso clássico, calcula-se a média temporal de $\langle \hat{O}(t) \rangle$:

$$\langle \langle \hat{O}(t) \rangle \rangle_t \equiv \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_0^\tau \langle \hat{O}(t) \rangle dt = \sum_i |c_i|^2 O_{ii}. \quad (6.2)$$

Espera-se então que essa média corresponda ao valor do observável \hat{A} estimado pela Mecânica Estatística⁴. Entretanto, segundo a Ref. [143], para sistemas unidimensionais integráveis isso nem sempre acontece. Para estes sistemas existem outros vínculos além da energia, por exemplo os projetores $P_j = |\phi_j\rangle \langle \phi_j|$, e portanto o sistema não relaxaria necessariamente para o *ensemble* de Gibbs usual. Para o modelo estudado em [143] o estado de equilíbrio é uma versão generalizada do *ensemble* de Gibbs, definida como $\rho_g = \exp\left(\sum_{j=1}^D \lambda_j O_j\right)$, onde $\{O_j\}$ é um conjunto de constantes de movimento independentes. Os coeficientes λ_j são multiplicadores de Lagrange determinados através da maximização da entropia $S = -k_\beta \rho_g \ln \rho_g$. O uso da maximização da entropia para determinar o estado de equilíbrio do sistema é baseado no fato da entropia de um sistema termodinâmico isolado ser máxima no equilíbrio [27].

Por outro lado, no modelo não-integrável estudado na Ref. [28], uma rede bidimensional com cinco *hard-core*⁵ bósons propagando no tempo, os autores mostram que a média temporal (6.2) realmente concorda com os valores fornecidos pelo *ensemble* micro-canônico $\langle \hat{A} \rangle_m$, ou seja,

$$\sum_i |c_i|^2 O_{ii} = \langle \hat{O} \rangle_m (E_0) \equiv \frac{1}{\mathcal{N}_{E_0, \Delta E}} \sum_i^* O_{ii}, \quad (6.3)$$

onde $E_0 = \sum_j |c_j|^2 E_j$ é a energia média e $\mathcal{N}_{E_0, \Delta E}$ é o número de autoestados com energias no intervalo $[E_0 - \Delta E, E_0 + \Delta E]$, com $(\Delta E)^2 = \sum_j |c_j|^2 (E_j - E_0)^2$. O símbolo “*” indica que a condição $|E_0 - E_i| < \Delta E$ deve ser satisfeita. Embora o

⁴A igualdade presente na equação (6.2) pode não ser válida se o espectro do Hamiltoniano for degenerado.

⁵Bósons que não podem ocupar o mesmo estado quântico.

lado direito da igualdade seja independente da condição inicial, o lado esquerdo carrega tal dependência nos coeficientes $|c_i|^2$. Uma maneira para justificar essa independência do estado inicial parte da condição de que a distribuição associada a $|c_i|^2$ é muito estreita, i.e., $(\Delta E)^2 \ll E_0$. Segundo [144] isso seria verdade para estados macroscópicos fisicamente possíveis⁶, pois para tais estados teríamos $\Delta E \propto N^{-1/2}E_0$. O passo seguinte consiste em assumir a hipótese introduzida por Deutsch e Srednicki [145; 146], “*The Eigenstate Thermalization Hypothesis*” (ETH). Tal hipótese faz uso de duas suposições: 1) a variação de O_{ii} com relação ao estado é muito suave, com $(O_{i+1i+1} - O_{ii}) \propto e^{-N}$, e 2) $O_{ij} \propto e^{-N}$ para $i \neq j$. Dessa forma $O(E)$ seria uma função suave da energia E . Com isso, O_{ii} seria praticamente uma constante no intervalo $[E_0 - \Delta E, E_0 + \Delta E]$, logo a igualdade acima seria verdadeira no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$. Como observado por M. Rigol *et al.* [28], segundo ETH a termalização se daria no nível dos autoestados, ou seja,

$$\langle \psi_i | \hat{O} | \psi_i \rangle = \langle \hat{O} \rangle_m(E_i), \quad (6.4)$$

e portanto a dinâmica não “construiria” o estado de equilíbrio, apenas o revelaria, ou seja, o estado de equilíbrio já existe em $t = 0$, mas é “escondido” pelas coerências. Embora não existam argumentos gerais a favor dessa hipótese, é possível verificar a sua validade para alguns modelos, integráveis e não-integráveis [145–147].

Ainda no contexto de sistemas não-integráveis, M. Bañuls *et al.* [33] abordaram o problema da termalização sobre outro ponto de vista. Eles estudaram a dinâmica dos valores médios de observáveis locais e como estas médias convergem para os valores estimados pela Mecânica Estatística. O estudo foi baseado na análise numérica do modelo de Ising unidimensional com interação de primeiros vizinhos sujeito a dois campos externos, h_x e h_z , descrito pelo seguinte Hamiltoniano (não-integrável se $h_x \neq 0$ e $h_z \neq 0$ [148]):

$$\hat{H} = - \sum_j \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z - h_x \sum_j \sigma_j^x - h_z \sum_j \sigma_j^z. \quad (6.5)$$

⁶Aqueles que poderiam ser preparados em um laboratório

Para cada condição inicial $|\psi(0)\rangle$ associou-se uma temperatura T , determinada através da equação:

$$E_0 = \frac{\text{Tr}(\hat{H}e^{-\beta\hat{H}})}{Z},$$

onde $\beta = 1/kT$ e E_0 é a energia do estado inicial. Porém, ao invés de calcular a média de um observável local⁷ \hat{O} com relação ao estado global evoluído $|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\psi(0)\rangle$, como feito acima, eles calcularam a média com relação ao operador densidade reduzido $\rho_S(t) = \text{Tr}_R(|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|)$ de um pequeno subsistema S do sistema global⁸ SR . O próximo passo foi comparar⁹ este estado reduzido com aquele obtido do *ensemble* de Gibbs $\rho_T = \text{Tr}_R(e^{-\beta(E_0)\hat{H}})/Z$. Distintos regimes de termalização foi observado, dependendo da condição inicial. Os autores denominaram *termalização forte* quando $\rho_S(t)$ converge para ρ_T , e *termalização fraca* quando $\langle\rho_S(t)\rangle$ converge para ρ_T , onde $\langle\rho_S(t)\rangle$ é a média temporal [análoga a eq. (6.2)]:

$$\langle\rho_S(t)\rangle \equiv \frac{1}{t/2} \int_{t/2}^t \rho_S(\tau) d\tau, \quad (6.6)$$

usada para eliminar a influência inicial da dinâmica. Para algumas condições iniciais nenhum destes regimes foram observados durante o tempo de simulação e portanto não se pode afirmar se haverá algum tipo de convergência. Entretanto, é importante notar que a convergência depende da condição inicial, ou seja, nem sempre os valores preditos pela dinâmica microscópica estarão de acordo com as previsões da Mecânica Estatística.

6.1 Termalização de Sistemas Abertos

O objetivo deste capítulo é investigar a dinâmica de um sistema em contato com um reservatório térmico a temperatura T , tendo como foco principal o

⁷Um operador com suporte em um subespaço com dimensão inferior a dimensão do espaço de Hilbert total.

⁸A cadeia de N spins é dividida em duas partes, uma com N_1 (sistema S) e outra com $N - N_1$ spins (sistema R), com $N_1 \ll N$. O operador densidade reduzido se refere a cadeia com N_1 spins.

⁹Para comparar os dois operadores densidade os autores usaram a medida de distância definida por $d(\rho_1, \rho_2) \equiv \|\rho_1 - \rho_2\|_{op}$, que coincide com o modulo do maior autovalor de $\rho_1 - \rho_2$. Tem-se $\rho_1 = \rho_2$ se, e somente se, $d(\rho_1, \rho_2) = 0$.

processo de termalização - determinar se o estado estacionário do sistema coincide com o *ensemble* de Gibbs. A motivação inicial surgiu com o estudo da relação entre as correlações quânticas e as transições de fase quânticas, desenvolvido no capítulo anterior. Naquela ocasião foi necessário assumir que o sistema estava em equilíbrio com um reservatório térmico a temperatura T e, além disso, que o estado de equilíbrio do sistema era descrito pelo *ensemble* de Gibbs:

$$\rho_T = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{Z}, \quad (6.7)$$

onde Z é a função de partição. Porém, diferente do que se discutiu até aqui, a nossa abordagem será baseada na teoria de sistema quânticos abertos [13], introduzida no Capítulo 3, quando estudamos a influência dos efeitos do meio-ambiente na dinâmica das correlações quânticas. Vamos relembrar agora as ideias centrais desta teoria e como elas se aplicam ao estudo da termalização.

Dado um sistema físico S , cujo espaço de Hilbert é \mathcal{H}_S , desejamos determinar qual a equação de movimento do estado deste sistema, $\rho(t)$, quando S interage com um reservatório térmico¹⁰ R , associado ao espaço de Hilbert \mathcal{H}_R . Nosso ponto de partida é o Hamiltoniano:

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_R + \hat{H}_{SR}, \quad (6.8)$$

onde \hat{H}_S e \hat{H}_R são, respectivamente, os Hamiltonianos do sistema e do reservatório, enquanto que H_{SR} descreve a interação entre o sistema e o reservatório. Até o momento, a dinâmica de sistemas abertos foi empregada apenas no tratamento de sistemas não-interagentes. Entretanto, como estamos interessados em investigar quando a Mecânica Estatística pode ser empregada e, principalmente, quando os resultados do capítulo anterior fornecem uma descrição correta da física dos modelos de spins, a análise de sistemas interagentes faz-se imprescindível.

Na Figura (6.1) são apresentados dois possíveis cenários neste contexto de sistemas abertos interagentes. Um sistema unidimensional S é dividido em subsistemas S_j com interação de primeiros vizinhos, onde cada subsistema interage com um reservatório térmico (Fig. (6.1a)). Neste caso os reservatórios são

¹⁰Relembre que, como R é um reservatório, se d_S e d_R são as dimensões de \mathcal{H}_S e \mathcal{H}_R , respectivamente, então $d_S \ll d_R$.

independentes, isto é, o operador densidade pertencente a \mathcal{H}_R tem a forma $\rho_{R_1} \otimes \rho_{R_2} \otimes \dots \otimes \rho_{R_N} \in \mathcal{H}_R$, onde ρ_{R_j} é o estado do reservatório que interage com o subsistema j . A temperatura de cada reservatório não precisa ser necessariamente a mesma. Isso abre a possibilidade de usar essa modelagem no estudo de fenômenos de transporte como, por exemplo, o transporte de calor [149; 150]. Em alguns trabalhos isso é feito assumindo que o primeiro e o último subsistema da cadeia estão em contato com reservatórios a temperaturas distintas, enquanto os demais subsistemas não interagem com nenhum reservatório, formando um gradiente de temperatura [149]. Como o nosso interesse repousa no problema da termalização, é necessário que todos os reservatórios estejam a mesma temperatura. Neste caso, outra possibilidade é assumir que todos os subsistemas interajam com o mesmo reservatório térmico a temperatura T , como ilustrado na Fig. (6.1b).

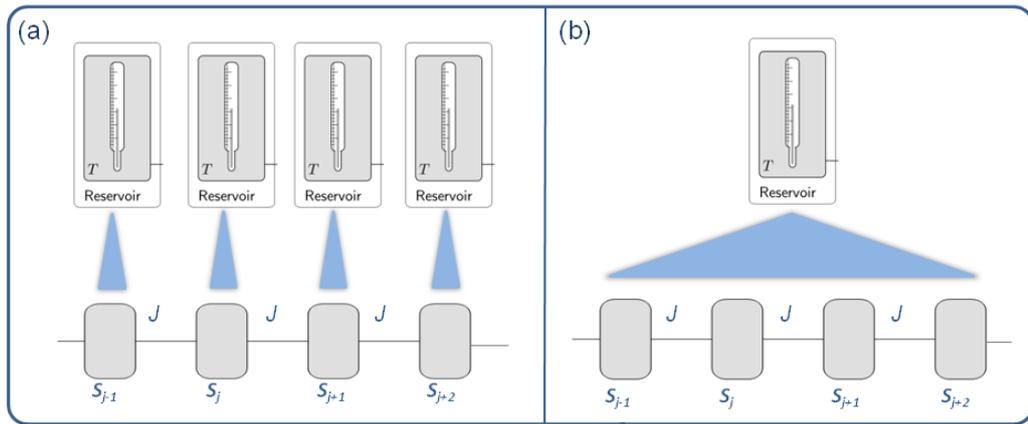


FIGURA 6.1: O sistema S é dividido em subsistemas S_j cuja interação entre eles é mediada pelo parâmetro J . (a) Cada subsistema interage com um reservatório térmico a temperatura T onde os reservatórios são independentes. (b) Todos os subsistemas interagem com o mesmo reservatório.

Assumindo que o sistema global $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_R$ é isolado, pode-se utilizar a equação de Liouville-von Neumann para descrever a dinâmica do operador densidade total $\rho_{SR} \in \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_R$:

$$\frac{d\rho_{SR}}{dt} = -i \left[\hat{H}, \rho_{SR} \right]. \quad (6.9)$$

Como estamos interessados na dinâmica do sistema S , precisamos encontrar uma equação de movimento para o operador densidade reduzido $\rho(t)$, que descreve o

estado do sistema S . Este operador densidade é obtido mediante o traço parcial do operador densidade total ρ_{SR} com relação as variáveis do reservatório, $\rho(t) = \text{Tr}_R(\rho_{SR}(t))$. Conforme a dedução apresentada no Apêndice B, a equação de movimento para o operador densidade $\rho(t)$ no regime de acoplamento fraco¹¹ é dada pela *equação mestra*:

$$\hat{\mathcal{L}}_t \rho(t) \equiv \frac{d}{dt} \rho(t) = -i [\hat{H}_S, \rho] + \hat{\mathcal{L}}(\rho), \quad (6.10)$$

onde o primeiro termo do lado direito da igualdade da conta da dinâmica unitária (reversível) do sistema, enquanto que o segundo termo:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\rho) &= \sum_{j=1}^{N_R} \gamma_j(0) \left[2\hat{A}_j(0)\rho(t)\hat{A}_j^\dagger(0) - \left\{ \hat{A}_j^\dagger(0)\hat{A}_j(0), \rho(t) \right\} \right] \\ &+ \sum_{j=1}^{N_R} \sum_{\omega>0} \gamma_j(\omega) \left[2\hat{A}_j(\omega)\rho(t)\hat{A}_j^\dagger(\omega) - \left\{ \hat{A}_j^\dagger(\omega)\hat{A}_j(\omega), \rho(t) \right\} \right] \\ &+ \sum_{j=1}^{N_R} \sum_{\omega>0} \gamma_j(-\omega) \left[2\hat{A}_j^\dagger(\omega)\rho(t)\hat{A}_j(\omega) - \left\{ \hat{A}_j(\omega)\hat{A}_j^\dagger(\omega), \rho(t) \right\} \right], \end{aligned} \quad (6.11)$$

é responsável pela dinâmica não-unitária (irreversível) oriunda da interação com o reservatório térmico. O parâmetro N_R representa o número de reservatórios. Por exemplo, nos exemplos da Figura (6.1) tem-se que (a) N_R é igual ao número de subsistemas de S ou (b) $N_R = 1$. Os operadores $\hat{A}_j(\omega)$ são definidos da seguinte forma:

$$\hat{A}_j(\omega) \equiv \sum_{\epsilon' - \epsilon = \omega} \Pi(\epsilon) \hat{A}_j \Pi(\epsilon'), \quad (6.12)$$

onde ϵ denota uma dada autoenergia do Hamiltoniano \hat{H}_S e $\Pi(\epsilon)$ o projetor associado ao autoespaço gerado pelos autoestados associados a ϵ ¹² associado a ϵ . A frequência ω refere-se ao *gap* de energia entre os níveis de energia ϵ' e ϵ . O operador hermitiano \hat{A}_j atua sobre \mathcal{H}_S e descreve a interação com o reservatório através do Hamiltoniano de interação:

$$\hat{H}_{SR} = \sum_{j=1}^{N_R} \hat{A}_j \otimes \hat{R}_j, \quad (6.13)$$

¹¹Este acoplamento se refere ao acoplamento entre o sistema S e o reservatório R

¹²É fundamental supor que o espectro de \hat{H}_S seja discreto.

onde \hat{R}_j é um operador hermitiano atuando sobre \mathcal{H}_R . Note que $\hat{A}_j(\omega)$ é construído a partir dos autoestados de \hat{H}_S , que dependem da interação entre os subsistemas.

A questão central a ser investigada neste capítulo diz respeito aos estados estacionários da equação mestra (6.10), ou seja, os operadores densidade ρ_{ss} que satisfazem a condição:

$$\hat{\mathcal{L}}_t \rho_{ss} = 0. \quad (6.14)$$

Como demonstrado na seção B3 do Apêndice B o estado térmico $\rho_T = e^{-\beta \hat{H}_S} / Z$ sempre satisfaz esta condição para qualquer \hat{A}_j . Em outras palavras, o estado térmico é um estado estacionário da equação mestra (6.10), embora ele não seja necessariamente o único estado estacionário. Tendo em vista essa observação, note também que se ρ_1 e ρ_2 são estados estacionários da equação (6.10), então a combinação convexa destes estados, $\lambda \rho_1 + (1 - \lambda) \rho_2$, também será um estado estacionário¹³. Neste caso o parâmetro λ é determinado pelas condições iniciais. Dessa forma, afirmar que um sistema termaliza é equivalente a afirmar que a equação mestra (6.10) possui um único estado estacionário ρ_{ss} , pois como o estado térmico é necessariamente um estado estacionário, a unicidade assegura que $\rho_{ss} = \rho_T$. Recentemente, A. Rivas e S. Huelga [74] demonstraram um teorema que estabelece uma condição necessária e suficiente para que a equação mestra (6.10) tenha um único estado estacionário:

Teorema 6.1 *A equação mestra (6.10) possui um único estado estacionário se, e somente se, o autovalor zero do superoperador $\hat{\mathcal{L}}_t$ for não-degenerado e se a parte real dos demais autovalores for negativa.*

Este Teorema pode ser entendido da seguinte maneira: sejam λ_j os autovalores do superoperador $\hat{\mathcal{L}}_t$. Cada autovalor pode ter associado a ele um ou mais operadores ρ_j satisfazendo a equação de autovalor $\hat{\mathcal{L}}_t \rho_j = \lambda_j \rho_j$. Todo operador densidade pode ser expresso como uma combinação linear dos ρ_j , logo, se $\rho(0)$ é uma condição inicial da equação mestra (6.10) então $\rho(0) = \sum_j c_j \rho_j$. Usando isso pode-se escrever a solução formal da equação (6.10) em termos de

¹³Para ver isso observe que $\hat{\mathcal{L}}_t(\lambda \rho_1 + (1 - \lambda) \rho_2) = \lambda \hat{\mathcal{L}}_t \rho_1 + (1 - \lambda) \hat{\mathcal{L}}_t \rho_2 = 0$

ρ_j :

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{L}}_t \rho(t) &\equiv \frac{d}{dt} \rho(t) \Rightarrow \rho(t) = e^{\hat{\mathcal{L}}_t t} \rho(0), \\ \rho(t) &= \sum_j c_j e^{\hat{\mathcal{L}}_t t} \rho_j, \\ \rho(t) &= \sum_j c_j e^{\lambda_j t} \rho_j.\end{aligned}$$

Decompondo λ_j em termos das suas componentes imaginária e real, $\lambda_j = \lambda_j^R + i\lambda_j^I$, podemos reescrever $\rho(t)$ como:

$$\rho(t) = \sum_j c_j \rho_j e^{i\lambda_j^I t} e^{\lambda_j^R t}. \quad (6.15)$$

Portanto, os termos do somatória acima se anularão assintoticamente¹⁴ ($t \rightarrow \infty$) sempre que $\lambda_j^R < 0$, restando assim apenas os termos com $\lambda_j^R = 0$, que podem oscilar no tempo devido ao fator $e^{i\lambda_j^I t}$. Logo, para que se tenha uma solução estacionária, sempre que $\lambda_j^R = 0$ deve-se ter também $\lambda_j^I = 0$, ou seja, $\lambda_j = 0$. Como dito acima, para evitar que a solução estacionária dependa da condição inicial é necessário que $\lambda_j = 0$ não seja degenerado.

Para investigar a termalização no contexto de sistemas abertos vamos utilizar dois modelos introduzidos no Capítulo 5: o modelo de Ising e o modelo XXZ. Ambos modelos descrevem uma cadeia de spins-1/2 unidimensional e são obtidos através do Hamiltoniano:

$$\hat{H}_S = \sum_{j=1}^{N-1} (J_x \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x + J_y \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y + \Delta \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z) - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (h_x \hat{\sigma}_j^x + h_z \hat{\sigma}_j^z), \quad (6.16)$$

onde h_x e h_z são campos externos atuando nas direções x e z . O reservatório térmico é modelado através de um conjunto infinito de osciladores harmônicos [13], uma descrição que tem se mostrado satisfatória tanto no domínio de Óptica Quântica [13; 151] quanto da Matéria Condensada [152; 153]. Portanto, se \hat{b}_k^\dagger é o operador que descreve a criação de um quanta de energia $\hbar\omega_k$ no modo bosônico k , então o Hamiltoniano \hat{H}_R que descreve o conjunto de osciladores harmônicos quânticos é dado por [13]:

$$\hat{H}_R = \sum_{j=1}^{N_R} \sum_k \omega_{kj} \hat{b}_{kj}^\dagger \hat{b}_{kj} = \sum_{j=1}^{N_R} \hat{H}_R^j, \quad (6.17)$$

¹⁴Como estamos considerando o regime de acoplamento fraco, tem-se que “ $t \rightarrow \infty$ ” representa um valor de t tal que $\frac{1}{g} \ll t \ll \frac{1}{g^2}$. Para $t \gg \frac{1}{g^2}$ os efeitos de segundo ordem com relação g devem ser considerados, ou seja, a equação mestra pode não fornecer uma descrição adequada da dinâmica do sistema.

onde \hat{H}_R^j descreve o j -ésimo reservatório (assumimos $\hbar = 1$). Neste ponto estamos considerando que cada spin está acoplado a um reservatório térmico. No caso em que todos os spins interagem com o mesmo reservatório, a somatória em j deve ser desconsiderada. A interação do sistema S com o reservatório R é modelada da seguinte forma:

$$\hat{H}_{SR} = \sum_{j=1}^N \hat{A}_j \sum_k g_{kj} \left(\hat{b}_{kj}^\dagger + \hat{b}_{kj} \right), \quad (6.18)$$

onde $\hat{A}_j = \hat{A}_j(\hat{\sigma}_j^x, \hat{\sigma}_j^y, \hat{\sigma}_j^z)$ e g_{kj} é o parâmetro que define o acoplamento entre o j -ésimo spin e o modo k do j -ésimo oscilador. No que segue vamos adotar $\hat{A}_j = \hat{\sigma}_j^x$. Isso nos permite descrever uma troca de energia entre os reservatórios térmicos e as cadeias de spins, descritas pelo Hamiltoniano \hat{H}_S , tendo em vista que $\hat{H}_S, [\hat{\sigma}_j^x] \neq 0$ [13; 153]. Portanto, o Hamiltoniano que descreve o sistema e o reservatório térmico pode ser escrito como:

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \sum_{j=1}^{N_R} \sum_k \omega_{kj} \hat{b}_{kj}^\dagger \hat{b}_{kj} + \sum_{j=1}^N \hat{\sigma}_j^x \sum_k g_{kj} \left(\hat{b}_{kj}^\dagger + \hat{b}_{kj} \right). \quad (6.19)$$

No caso de reservatórios térmicos mostramos no Apêndice B que $\gamma_j(\omega)$ e $\gamma_j(-\omega)$ são funções da densidade espectral do reservatório $f_j(\omega)$ e do número médio de excitações com energia $\hbar\omega$, $N(\omega)$:

$$\gamma_j(\omega) = f_j(\omega)(1 + N(\omega)) \quad \text{e} \quad \gamma_j(-\omega) = f_j(\omega)N(\omega), \quad (6.20)$$

onde $N(\omega) = (e^{\beta\hbar\omega} - 1)^{-1}$ com $\beta = 1/kT$. Note que a dependência com a temperatura aparece apenas no número médio de excitações $N(\omega)$. A partir de agora vamos assumir que todos os reservatórios sejam descritos pela mesma densidade espectral $f_j(\omega) = f(\omega)$, para todo j .

6.1.1 Modelo de Ising

O Hamiltoniano do modelo de Ising \hat{H}_I sujeito a campos externos nas direções x e z é obtido a partir de \hat{H}_S fazendo $J_x = J_y = 0$:

$$\hat{H}_I = \Delta \sum_{j=1}^{N-1} \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (h_x \hat{\sigma}_j^x + h_z \hat{\sigma}_j^z). \quad (6.21)$$

Inicialmente vamos nos restringir ao estudo de dois spins interagentes ($N = 2$) acoplados a dois reservatórios térmicos ($N_R = 2$) com a mesma temperatura T . Posteriormente abordaremos o caso $N_R = 1$ (reservatório comum) e apresentaremos alguns resultados relativos a N arbitrário. O primeiro passo para analisar o caso $N = 2$ é achar uma expressão analítica para a equação mestra (6.10) em termos dos autoestados do Hamiltoniano (6.21), utilizados na construção dos operadores $\hat{A}_j(\omega)$. Observe que o somatório com relação a ω na equação (6.11) envolve apenas frequências positivas, uma condição que dificulta muito o cálculo da equação mestra (6.10) dado um Hamiltoniano qualquer, tanto analiticamente quanto numericamente. Felizmente nós conseguimos desenvolver um algoritmo em Matlab que permite obter e resolver a equação mestra dado um Hamiltoniano qualquer e a forma da interação entre o sistema e o reservatório, definida pelos operadores \hat{A}_j .

No entanto, como é comum nos problemas computacionais envolvendo a Mecânica Quântica, a eficiência do algoritmo depende fortemente da dimensão do espaço de Hilbert do sistema¹⁵, denotada por M . A primeira dificuldade surge quando se tenta calcular os operadores $\hat{A}_j(\omega)$, que dependem da diagonalização do Hamiltoniano do sistema, i.e., a diagonalização de uma matriz $M \times M$. Mesmo quando tal diagonalização é viável, surge um segundo problema, a diagonalização do superoperador $\hat{\mathcal{L}}_t$, cuja representação matricial possui dimensão $M^2 \times M^2$. Alguns dos problemas tratados neste capítulo serão resolvidos analiticamente, quando isso não for possível faremos uso de métodos numéricos.

6.1.1.1 Caso $N = 2$ com N_R arbitrário

Antes de abordar o caso $h_x \neq 0$ e $h_z \neq 0$ vamos discutir o que acontece quando $h_z = h_x = 0$. Nesta situação é possível mostrar que existe uma constante de movimento¹⁶ associada ao Hamiltoniano total (6.19) com $\hat{H}_S = \hat{H}_I$. Esta constante de movimento é definida pelo operador $\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x$. Para verificar isso note que $[\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x, \hat{H}_{SR}] = 0$, pois $[\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x, \hat{\sigma}_j^x] = 0$ para todo j , logo $[\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x, \hat{H}] =$

¹⁵Para um sistema de N spins-1/2 tem-se que $M = N^2$.

¹⁶Um operador que comuta com o Hamiltoniano que descreve o sistema.

$[\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x, \hat{H}_S]$. Por outro lado,

$$\begin{aligned}
[\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x, \hat{H}_S] &= \Delta [\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x, \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_2^z] \\
&= \Delta \hat{\sigma}_1^z [\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x, \hat{\sigma}_2^z] + \Delta [\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x, \hat{\sigma}_1^z] \hat{\sigma}_2^z \\
&= \Delta \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_1^x [\hat{\sigma}_2^x, \hat{\sigma}_2^z] + \Delta [\hat{\sigma}_1^x, \hat{\sigma}_1^z] \hat{\sigma}_2^x \hat{\sigma}_2^z \\
&= -2i\Delta \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^y - 2i\Delta \hat{\sigma}_2^z \hat{\sigma}_2^x \hat{\sigma}_1^y \\
&= 2\Delta \hat{\sigma}_1^y \hat{\sigma}_2^y - 2\Delta \hat{\sigma}_1^y \hat{\sigma}_2^y \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{6.22}$$

Logo, $[\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x, \hat{H}] = 0$, mostrando que $\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x$ é uma constante de movimento. Portanto, neste caso *não* haverá termalização, pois dadas duas condições iniciais $\rho_1(0)$ e $\rho_2(0)$, com¹⁷ $\langle \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \rangle_1 \neq \langle \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \rangle_2$, o sistema evoluirá para dois estados estacionários distintos, desde que a quantidade $\langle \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \rangle$ deve ser conservada durante a evolução. Note que isso acontece independente do número de reservatórios e dos estados dos mesmos, isto é, independente da temperatura do reservatório.

Vamos analisar agora a influência dos campos externos h_x e h_z . O argumento anterior continua verdadeiro para $h_z = 0$ e $h_x \neq 0$, pois $[\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x, h_x \sum_{j=1}^N \hat{\sigma}_j^x] = 0$. Isso já era esperado tendo em vista que $\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x$ comuta com o Hamiltoniano de interação sistema-reservatório $\hat{H}_{SR} = \sum_{j=1}^N \hat{\sigma}_j^x \otimes \hat{R}_j$, definido em termos de $\hat{\sigma}_j^x$. Por outro lado, a presença de um campo na direção z com intensidade arbitrária invalida esse argumento, tendo em vista que $[\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x, \hat{\sigma}_j^z] \neq 0$. A inexistência de uma constante de movimento para $h_x \neq 0$ e $h_z \neq 0$ não será um surpresa tendo em vista que neste caso o modelo de Ising é não-integrável [148].

6.1.1.2 Reservatórios Térmicos Independentes: $N = N_R = 2$

Impondo as condições $N = 2$, $N_R = 2$ e $h_x = 0$ a diagonalização do Hamiltoniano (6.21) resulta nas autoenergias e autoestados apresentados abaixo:

$$\begin{aligned}
\epsilon_1 &= -\Delta & \text{com} & \quad |\uparrow\downarrow\rangle \quad \text{e} \quad |\downarrow\uparrow\rangle, \\
\epsilon_2 &= \Delta - h_z & \text{com} & \quad |\uparrow\uparrow\rangle, \\
\epsilon_3 &= \Delta + h_z & \text{com} & \quad |\downarrow\downarrow\rangle,
\end{aligned} \tag{6.23}$$

¹⁷ $\langle \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \rangle_k = \text{Tr}(\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \rho_k)$.

com $h_z > 0$. Para $2\Delta > h_z$ vale a relação $\epsilon_1 < \epsilon_2 < \epsilon_3$ e o estado fundamental é degenerado, enquanto que para $2\Delta < h_z$ tem-se $\epsilon_2 < \epsilon_1 < \epsilon_3$ e o primeiro estado excitado torna-se degenerado. Como os operadores $\hat{A}_j(\omega)$ dependem do ordenamento do espectro de energia, a equação mestra que governa a dinâmica do sistema para $2\Delta > h_z$ é diferente daquela obtida para $2\Delta < h_z$. Ainda, para o caso $2\Delta = h_z$ teremos uma terceira equação mestra, pois o sistema terá um estado fundamental triplamente degenerado.

Equação Mestra para $h_z < 2\Delta$:

Agora, vamos voltar a nossa atenção para o caso $h_z < 2\Delta$. Os autoestados (6.23) definem uma base para o espaço de Hilbert dos dois spins:

$$\{|1\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle, |2\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle, |3\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, |4\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle\}. \quad (6.24)$$

Nesta base os operadores \hat{A}_j assumem a seguinte forma matricial:

$$\hat{A}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{A}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.25)$$

Como $\epsilon_1 < \epsilon_2 < \epsilon_3$, não é difícil ver que as únicas frequências positivas são:

$$\omega_{12} = 2\Delta - h_z \quad , \quad \omega_{13} = 2\Delta + h_z \quad , \quad \omega_{23} = 2h_z,$$

com $\omega_{ij} = \epsilon_j - \epsilon_i$. Usando a definição (6.12) e a representação matricial dos operadores \hat{A}_j acima, podemos determinar os operadores $\hat{A}_j(\omega)$:

$$\begin{aligned} \hat{A}_1(\omega_{12}) &= |2\rangle\langle 3| \quad , \quad \hat{A}_1(\omega_{13}) = |1\rangle\langle 4| \quad , \quad \hat{A}_1(\omega_{23}) = 0, \\ \hat{A}_2(\omega_{12}) &= |1\rangle\langle 3| \quad , \quad \hat{A}_2(\omega_{13}) = |2\rangle\langle 4| \quad , \quad \hat{A}_2(\omega_{23}) = 0. \end{aligned}$$

Além disso, tem-se que $\hat{A}_j(0) = 0$. Substituindo esses operadores na equação

(6.10) chegamos à seguinte equação mestra para o modelo de Ising com $h_z < 2\Delta$:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{L}}_t \rho(t) = & -i \left[\hat{H}_I, \rho \right] \\
& + \gamma(\omega_{12}) (2|2\rangle \langle 3| \rho |3\rangle \langle 2| - |3\rangle \langle 3| \rho - \rho |3\rangle \langle 3|) \\
& + \gamma(-\omega_{12}) (2|3\rangle \langle 2| \rho |2\rangle \langle 3| - |2\rangle \langle 2| \rho - \rho |2\rangle \langle 2|) \\
& + \gamma(\omega_{13}) (2|1\rangle \langle 4| \rho |4\rangle \langle 1| - |4\rangle \langle 4| \rho - \rho |4\rangle \langle 4|) \\
& + \gamma(-\omega_{13}) (2|4\rangle \langle 1| \rho |1\rangle \langle 4| - |1\rangle \langle 1| \rho - \rho |1\rangle \langle 1|) \quad (6.26) \\
& + \gamma(\omega_{12}) (2|1\rangle \langle 3| \rho |3\rangle \langle 1| - |3\rangle \langle 3| \rho - \rho |3\rangle \langle 3|) \\
& + \gamma(-\omega_{12}) (2|3\rangle \langle 1| \rho |1\rangle \langle 3| - |1\rangle \langle 1| \rho - \rho |1\rangle \langle 1|) \\
& + \gamma(\omega_{13}) (2|2\rangle \langle 4| \rho |4\rangle \langle 2| - |4\rangle \langle 4| \rho - \rho |4\rangle \langle 4|) \\
& + \gamma(-\omega_{13}) (2|4\rangle \langle 2| \rho |2\rangle \langle 4| - |2\rangle \langle 2| \rho - \rho |2\rangle \langle 2|) .
\end{aligned}$$

Na seção B6 do Apêndice B nós discutimos como obter uma representação matricial do superoperador $\hat{\mathcal{L}}_t$. Através da escolha adequada de base podemos escrever o superoperador $\hat{\mathcal{L}}_t$ na forma de uma matriz bloco-diagonal de dimensão 16×16 :

$$\hat{\mathcal{L}}_t = \begin{pmatrix} D_{12 \times 12} & 0 \\ 0 & M_{4 \times 4} \end{pmatrix}_{16 \times 16}, \quad (6.27)$$

onde $D_{12 \times 12} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_{12})$ é uma matriz diagonal com:

$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= -2\gamma(-\omega_{12}) - 2\gamma(-\omega_{13}), \\
\lambda_2 &= i\omega_{12} - 2\gamma(\omega_{12}) - 2\gamma(-\omega_{13}), \\
\lambda_3 &= i\omega_{13} - 2\gamma(\omega_{13}) - \gamma(-\omega_{13}) - \gamma(-\omega_{12}), \\
\lambda_4 &= i\omega_{12} - 2\gamma(\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{13}), \\
\lambda_5 &= i\omega_{13} - 2\gamma(\omega_{13}) - \gamma(-\omega_{13}) - \gamma(-\omega_{12}), \\
\lambda_6 &= i\omega_{23} - 2\gamma(\omega_{12}) - \gamma(\omega_{13}), \\
\lambda_7 &= -2\gamma(-\omega_{12}) - 2\gamma(-\omega_{13}), \\
\lambda_8 &= -i\omega_{12} - 2\gamma(\omega_{12}) - 2\gamma(-\omega_{13}), \\
\lambda_9 &= -i\omega_{13} - 2\gamma(\omega_{13}) - \gamma(-\omega_{13}) - \gamma(-\omega_{12}), \\
\lambda_{10} &= -i\omega_{12} - 2\gamma(\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{13}), \\
\lambda_{11} &= -i\omega_{13} - 2\gamma(\omega_{13}) - \gamma(-\omega_{13}) - \gamma(-\omega_{12}), \\
\lambda_{12} &= -i\omega_{23} - 2\gamma(\omega_{12}) - \gamma(\omega_{13}),
\end{aligned}$$

enquanto que a matriz $M_{4 \times 4}$ é dada por:

$$M = 2 \begin{pmatrix} -\gamma(-\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{13}) & 0 & \gamma(\omega_{12}) & \gamma(\omega_{13}) \\ 0 & -\gamma(-\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{13}) & \gamma(\omega_{12}) & \gamma(\omega_{13}) \\ \gamma(-\omega_{12}) & \gamma(-\omega_{12}) & -2\gamma(\omega_{12}) & 0 \\ \gamma(-\omega_{13}) & \gamma(-\omega_{13}) & 0 & -2\gamma(\omega_{13}) \end{pmatrix}.$$

Para verificar qual a influência do campo externo $h_z < 2\Delta$ na termalização do modelo de Ising vamos aplicar o Teorema (6.1). Para tanto, o primeiro passo é diagonalizar o superoperador $\hat{\mathcal{L}}_t$, ou seja, diagonalizar as matrizes $D_{12 \times 12}$ e $M_{4 \times 4}$. A matriz $D_{12 \times 12}$ já se encontra na forma diagonal e como $\gamma(\pm\omega) \geq 0$, a parte real dos autovalores é sempre $\text{Re}(\lambda_j) \leq 0$. Como $f(\omega) > 0$ para todo ω , tem-se que $\text{Re}(\lambda_j) < 0$ para $T > 0$. Para ver isso note que segundo (6.20) a função $\gamma(\omega) > 0$ para $T \geq 0$, enquanto que $\gamma(-\omega) > 0$ apenas para $T > 0$, pois no regime de temperatura nula $\gamma(-\omega) = 0$, tendo em vista que $N(\omega) \rightarrow 0$ para $T \rightarrow 0$. Portanto, como os autovalores $\lambda_1 = \lambda_7 = 0$ para $T = 0K$, segundo o Teorema (6.1) o sistema *não* irá termalizar, pois o autovalor nulo é degenerado. Para o caso $T > 0$ tem-se $\text{Re}(\lambda_j) < 0$ e portanto precisamos calcular os autovalores de $M_{4 \times 4}$ para determinar se haverá ou não termalização. Os autovalores de $M_{4 \times 4}$ são:

$$\begin{aligned} \lambda_{13} &= 0, \\ \lambda_{14} &= -2\gamma(-\omega_{12}) - 2\gamma(-\omega_{13}), \\ \lambda_{15} &= \eta + \alpha, \\ \lambda_{16} &= \eta - \alpha, \end{aligned}$$

com

$$\begin{aligned} \eta &= -2\gamma(\omega_{12}) - 2\gamma(\omega_{13}) - \gamma(-\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{13}), \\ \alpha &= \sqrt{(\gamma(\omega_{12}) + \gamma(\omega_{13}))^2 + 4(\gamma(\omega_{13}) - \gamma(-\omega_{12}))^2} + \zeta, \end{aligned}$$

onde

$$\zeta = 4[\gamma(\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{13})](\gamma(-\omega_{12}) - \gamma(\omega_{13})),$$

Para $T > 0$ temos $\lambda_{14}, \lambda_{15}, \lambda_{16} < 0$ e $\lambda_{13} = 0$, ou seja, o autovalor nulo não é degenerado e $\text{Re}(\lambda_j) < 0$ para todo $j \neq 13$. Sempre haverá pelo menos

um autovalor nulo, pois o estado térmico sempre será um estado estacionário do sistema. Isso mostra que a aplicação de um campo externo na direção z garante a termalização do sistema para $T > 0$. Já no caso $T = 0K$ o autovalor nulo será degenerado $\lambda_1 = \lambda_7 = \lambda_{13} = \lambda_{14} = 0$, inviabilizando a termalização do sistema.

Embora a termalização sempre ocorra para $T > 0$, é importante determinar o tempo necessário para a termalização do sistema τ e, principalmente, qual a dependência com a temperatura. Segundo a equação (6.15), a solução formal da equação mestra para o modelo de Ising pode ser expressa como:

$$\rho(t) = N_{orm} \left(c_{13}\rho_{13} + \sum_{j=1,7,14} c_j \rho_j e^{\lambda_j t} + \sum_{j \neq 1,7,13,14} c_j \rho_j e^{\lambda_j t} \right), \quad (6.28)$$

onde N_{orm} é o fator de normalização. Para $T > 0$ temos que $\rho(t) \rightarrow c_{13}\rho_{13}$ quando $t \rightarrow \infty$. Entretanto, conforme $T \rightarrow 0$ os autovalores λ_1, λ_7 e λ_{14} também tendem a zero, enquanto os demais autovalores permanecem diferentes de zero, i.e., a degenerescência do autovalor nulo surge destes autovalores a medida que T diminui. Isso nos permite definir um tempo característico da dinâmica do sistema denominado *tempo de termalização*¹⁸ como $\tau \equiv 1/|\lambda_m|$, onde $|\lambda_m|$ é módulo da parte real do autovalor de $\hat{\mathcal{L}}_t$ que estiver mais próximo de zero. Como $\text{Re}(\lambda_j) \leq 0$ o autovalor λ_m será aquele que estiver mais próximo de zero. No caso dos autovalores acima note que $\lambda_1 = \lambda_7 = \lambda_{14}$ tendem a zero conforme T se aproxima de zero. Em um regime de baixas temperaturas estes autovalores serão muito pequenos tornando a evolução até o estado estacionário muito lenta. Portanto, o tempo de termalização associado a equação mestra acima será dado por:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= \lambda_1 = 2\gamma(-\omega_{12}) + 2\gamma(-\omega_{13}), \\ &= 2 \left(\frac{f(\omega_{12})}{e^{\omega_{12}/kT} - 1} + \frac{f(\omega_{13})}{e^{\omega_{13}/kT} - 1} \right), \end{aligned} \quad (6.29)$$

onde usamos a equação (6.20). Definimos o regime de *altas temperaturas* como aquele em que $kT \gg \omega_{12}, \omega_{13}$. Neste regime $e^{\omega/kT} \approx 1$ e o tempo de termalização será muito rápido, $\tau \ll 1$. Como $\omega_{12} = 2\Delta - h_z$ (gap entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado) e $\omega_{13} = 2\Delta + h_z$ (gap entre o estado fundamental e o estado $|\downarrow\downarrow\rangle$) tornam-se maiores conforme h aumenta, a temperatura exigida

¹⁸Como estamos usando Hamiltonianos adimensionais o tempo de termalização também será adimensional.

para garantir a termalização do sistema também aumenta. Porém, esse aumento de h_z não pode ser arbitrário tendo em vista que a condição $h_z < 2\Delta$ deve ser respeitada. No limite oposto, denominado regime de *baixas temperaturas*, quando $kT \ll \omega_{12}, \omega_{13}$, pode-se fazer a aproximação $e^{\omega/kT} \gg 1$. Neste caso, o tempo de termalização é aproximadamente:

$$\frac{1}{\tau} \approx 2 \left(\frac{f(\omega_{12})}{e^{\omega_{12}/kT}} + \frac{f(\omega_{13})}{e^{\omega_{13}/kT}} \right), \quad (6.30)$$

usando $\omega_{12} = 2\Delta - h_z$ e $\omega_{13} = 2\Delta + h_z$,

$$\tau \approx \frac{2e^{2\Delta/kT}}{f(\omega_{12})e^{h_z/kT} + f(\omega_{13})e^{-h_z/kT}}. \quad (6.31)$$

Podemos avançar essa análise assumindo $kT \rightarrow 0$, neste cenário o tempo de termalização irá divergir, como demonstrado pela seguinte expressão:

$$\tau \approx \frac{2}{f(\omega_{12})} e^{\frac{\omega_{12}}{kT}}, \quad (6.32)$$

que depende do gap entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado ω_{12} . Portanto, embora o sistema sempre alcance o estado de equilíbrio para $T > 0$, o tempo para atingir tal estado pode ser muito longo. Isso tem implicações interessantes no que se refere aos estudos do capítulo anterior, pois o estudo de transições de fase quânticas necessita de um regime de baixas temperaturas.

O tempo de termalização refere-se ao tempo necessário para o sistema atingir o estado estacionário independente da condição inicial. Entretanto, para algumas condições iniciais, o sistema pode atingir o estado estacionário para algum $t < \tau$. Para entender este ponto observe a equação (6.28). Os coeficientes c_j são determinados a partir da condição inicial $\rho(0) = \sum_j c_j \rho_j$, logo se a componente ρ_k associada ao autovalor λ_k , que define τ , não estiver presente na condição inicial ($c_k = 0$), então a dinâmica será determinada por outro autovalor λ_i , cuja componente real satisfaz $|\text{Re}(\lambda_k)| < |\text{Re}(\lambda_i)|$. Dessa forma, para algumas condições iniciais o estado estacionário pode ser atingido para valores de t tais que $\tau > t \gg 1/|\text{Re}(\lambda_i)|$.

Para investigar a dinâmica do sistema em $T = 0K$ vamos determinar o operador densidade do sistema $\rho(t)$ na base (6.24). Nesta base as populações do operador densidade, $\rho_{i,i}(t) = \langle i | \rho(t) | i \rangle$, com $i = 1, \dots, 4$, são calculadas

resolvendo o seguinte sistema de equações diferenciais acopladas¹⁹:

$$\begin{pmatrix} \dot{\rho}_{1,1} \\ \dot{\rho}_{2,2} \\ \dot{\rho}_{3,3} \\ \dot{\rho}_{4,4} \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & f(\omega_{12}) & f(\omega_{13}) \\ 0 & 0 & f(\omega_{12}) & f(\omega_{13}) \\ 0 & 0 & -2f(\omega_{12}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2f(\omega_{13}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{1,1} \\ \rho_{2,2} \\ \rho_{3,3} \\ \rho_{4,4} \end{pmatrix}, \quad (6.33)$$

cuja solução é apresentada abaixo:

$$\begin{aligned} \rho_{1,1}(t) &= \rho_{1,1}(0) + \frac{1}{2} (1 - e^{-4f(\omega_{12})t}) \rho_{3,3}(0) + \frac{1}{2} (1 - e^{-4f(\omega_{13})t}) \rho_{4,4}(0), \\ \rho_{2,2}(t) &= \rho_{2,2}(0) + \frac{1}{2} (1 - e^{-4f(\omega_{12})t}) \rho_{3,3}(0) + \frac{1}{2} (1 - e^{-4f(\omega_{13})t}) \rho_{4,4}(0), \\ \rho_{3,3}(t) &= e^{-4f(\omega_{12})t} \rho_{3,3}(0), \\ \rho_{4,4}(t) &= e^{-4f(\omega_{13})t} \rho_{4,4}(0). \end{aligned}$$

A dinâmica das coerências é obtida através dos autovalores da matriz $D_{12 \times 12}$. Como discutido acima, com exceção dos autovalores λ_1 e λ_7 , todos os demais autovalores possuem parte real negativa. Como $\lambda_1 = \lambda_7 = 0$ no regime de temperatura nula e $\dot{\rho}(t)_{1,2} = \lambda_1 \rho_{1,2}(t)$, as coerências permanecem constantes durante a evolução do sistema:

$$\rho_{1,2}(t) = \rho_{1,2}(0) \quad \text{e} \quad \rho_{2,1}(t) = \rho_{2,1}(0).$$

Dessa forma, os elementos do operador densidade $\rho(t)$ que podem contribuir no regime assintótico são:

$$\begin{aligned} \rho_{1,1}(t \rightarrow \infty) &= \rho_{1,1}(0) + \frac{1}{2} (\rho_{3,3}(0) + \rho_{4,4}(0)), \\ \rho_{2,2}(t \rightarrow \infty) &= \rho_{2,2}(0) + \frac{1}{2} (\rho_{3,3}(0) + \rho_{4,4}(0)), \\ \rho_{1,2}(t \rightarrow \infty) &= \rho_{1,2}(0). \end{aligned} \quad (6.34)$$

Com isso mostra-se que a dinâmica tende a popular apenas os dois estados fundamentais do Hamiltoniano, $|1\rangle$ e $|2\rangle$, conforme o sistema se aproxima do regime estacionário. Além disso, note que o estado estacionário depende das condições iniciais, inclusive das populações iniciais dos estados excitados $|3\rangle$ e $|4\rangle$. Para comparar este estado estacionário com aquele previsto pelo *ensemble*

¹⁹Para maiores detalhes consultar o Apêndice B.

de Gibbs vamos calcular o limite da equação (6.7) para $T \rightarrow 0$. A função de partição é dada pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} = \sum_{i=1}^4 \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} |i\rangle \langle i| \right) \\ &= \text{Tr} \left(e^{-\beta \epsilon_1} (|1\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2|) + e^{-\beta \epsilon_2} |3\rangle \langle 3| + e^{-\beta \epsilon_3} |4\rangle \langle 4| \right) \\ &= e^{-\beta \epsilon_1} \left(2 + e^{-\beta(\epsilon_2 - \epsilon_1)} + e^{-\beta(\epsilon_3 - \epsilon_1)} \right). \end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned} \rho_T &= \frac{e^{-\beta \epsilon_1} (|1\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2|) + e^{-\beta(\epsilon_2 - \epsilon_1)} |3\rangle \langle 3| + e^{-\beta(\epsilon_3 - \epsilon_1)} |3\rangle \langle 3|}{Z} \\ &= \frac{|1\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2| + e^{-\beta(\epsilon_2 - \epsilon_1)} |3\rangle \langle 3| + e^{-\beta(\epsilon_3 - \epsilon_1)} |3\rangle \langle 3|}{2 + e^{-\beta(\epsilon_2 - \epsilon_1)} + e^{-\beta(\epsilon_3 - \epsilon_1)}}. \end{aligned} \quad (6.35)$$

Como $\epsilon_3 - \epsilon_1 > 0$ e $\epsilon_2 - \epsilon_1 > 0$, o estado térmico (6.35) no limite de $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) assume a forma:

$$\rho_{T \rightarrow 0} = \frac{|1\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2|}{2}. \quad (6.36)$$

Como pode-se ver nas equações (6.34) o estado térmico é uma solução estacionária possível, mas não é a única. Por exemplo, qualquer coerência inicial entre os estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$ é suficiente para impedir a convergência para o estado $\rho_{T \rightarrow 0}$.

Equação Mestra para $h_z > 2\Delta$:

Até agora investigamos o problema para o caso $h_z < 2\Delta$. Para verificar o que ocorre para $h_z > 2\Delta$ basta proceder de forma análoga. O espectro do sistema para $h_z > 2\Delta$ é dado por:

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= \Delta - h_z && \text{com} && |\uparrow\uparrow\rangle, \\ \epsilon_2 &= -\Delta && \text{com} && |\uparrow\downarrow\rangle \text{ e } |\downarrow\uparrow\rangle, \\ \epsilon_3 &= \Delta + h_z && \text{com} && |\downarrow\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (6.37)$$

formando a seguinte base para o sistema de dois spins:

$$\{|1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, |2\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle, |3\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle, |4\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle\} \quad (6.38)$$

Observe que neste caso, ao invés do estado fundamental ser degenerado, a degenerescência aparece apenas no primeiro estado excitado. Os operadores $\hat{A}_j(\omega)$

serão portanto:

$$\begin{aligned}\hat{A}_1(\omega_{12}) &= |1\rangle\langle 3|, & \hat{A}_1(\omega_{23}) &= |2\rangle\langle 4|, & \hat{A}_1(\omega_{13}) &= 0, \\ \hat{A}_2(\omega_{12}) &= |1\rangle\langle 2|, & \hat{A}_2(\omega_{23}) &= |3\rangle\langle 4|, & \hat{A}_2(\omega_{13}) &= 0.\end{aligned}$$

A equação mestra para o modelo de Ising com $h_z > 2\Delta$ é escrita como:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{L}}_t\rho(t) &= -i\left[\hat{H}_I, \rho\right] \\ &+ \gamma(\omega_{12}) (2|1\rangle\langle 3|\rho|3\rangle\langle 1| - |3\rangle\langle 3|\rho - \rho|3\rangle\langle 3|) \\ &+ \gamma(-\omega_{12}) (2|3\rangle\langle 1|\rho|1\rangle\langle 3| - |1\rangle\langle 1|\rho - \rho|1\rangle\langle 1|) \\ &+ \gamma(\omega_{23}) (2|2\rangle\langle 4|\rho|4\rangle\langle 2| - |4\rangle\langle 4|\rho - \rho|4\rangle\langle 4|) \\ &+ \gamma(-\omega_{23}) (2|4\rangle\langle 2|\rho|2\rangle\langle 4| - |2\rangle\langle 2|\rho - \rho|2\rangle\langle 2|) \quad (6.39) \\ &+ \gamma(\omega_{12}) (2|1\rangle\langle 2|\rho|2\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2|\rho - \rho|2\rangle\langle 2|) \\ &+ \gamma(-\omega_{12}) (2|2\rangle\langle 1|\rho|1\rangle\langle 2| - |1\rangle\langle 1|\rho - \rho|1\rangle\langle 1|) \\ &+ \gamma(\omega_{23}) (2|3\rangle\langle 4|\rho|4\rangle\langle 3| - |4\rangle\langle 4|\rho - \rho|4\rangle\langle 4|) \\ &+ \gamma(-\omega_{23}) (2|4\rangle\langle 3|\rho|3\rangle\langle 4| - |3\rangle\langle 3|\rho - \rho|3\rangle\langle 3|).\end{aligned}$$

A diagonalização do superoperador $\hat{\mathcal{L}}_t$ referente a essa equação mestra é semelhante ao caso anterior. Novamente podemos representar $\hat{\mathcal{L}}_t$ através de uma matriz bloco-diagonal da forma:

$$\hat{\mathcal{L}}_t = \begin{pmatrix} D_{12\times 12} & 0 \\ 0 & M_{4\times 4} \end{pmatrix}_{16\times 16}, \quad (6.40)$$

onde $D_{12 \times 12} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_{12})$ é uma matriz diagonal com:

$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= i\omega_{12} - 2\gamma(-\omega_{12}) - \gamma(\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{23}), \\
\lambda_2 &= i\omega_{12} - 2\gamma(-\omega_{12}) - \gamma(\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{23}), \\
\lambda_3 &= i\omega_{13} - 2\gamma(-\omega_{12}) - 2\gamma(\omega_{23}), \\
\lambda_4 &= -2\gamma(\omega_{12}) - 2\gamma(-\omega_{23}), \\
\lambda_5 &= i\omega_{23} - 2\gamma(\omega_{23}) - \gamma(\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{23}), \\
\lambda_6 &= i\omega_{23} - 2\gamma(\omega_{23}) - \gamma(\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{23}), \\
\lambda_7 &= -i\omega_{12} - 2\gamma(-\omega_{12}) - \gamma(\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{23}), \\
\lambda_8 &= -i\omega_{12} - 2\gamma(-\omega_{12}) - \gamma(\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{23}), \\
\lambda_9 &= -i\omega_{13} - 2\gamma(-\omega_{12}) - 2\gamma(\omega_{23}), \\
\lambda_{10} &= -2\gamma(\omega_{12}) - 2\gamma(-\omega_{23}), \\
\lambda_{11} &= -i\omega_{23} - 2\gamma(\omega_{23}) - \gamma(\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{23}), \\
\lambda_{12} &= -i\omega_{23} - 2\gamma(\omega_{23}) - \gamma(\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{23}),
\end{aligned}$$

enquanto que a matriz $M_{4 \times 4}$ é dada por:

$$M = 2 \begin{pmatrix} -2\gamma(-\omega_{12}) & \gamma(\omega_{12}) & \gamma(\omega_{12}) & 0 \\ \gamma(-\omega_{12}) & -\gamma(\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{23}) & 0 & \gamma(\omega_{23}) \\ \gamma(-\omega_{12}) & 0 & -\gamma(\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{23}) & \gamma(\omega_{23}) \\ 0 & \gamma(-\omega_{23}) & \gamma(-\omega_{23}) & -2\gamma(\omega_{23}) \end{pmatrix},$$

cujos autovalores são:

$$\begin{aligned}
\lambda_{13} &= 0, \\
\lambda_{14} &= -2\gamma(\omega_{12}) - 2\gamma(-\omega_{23}), \\
\lambda_{15} &= \eta + \alpha, \\
\lambda_{16} &= \eta - \alpha,
\end{aligned}$$

com

$$\begin{aligned}
\eta &= -2\gamma(-\omega_{12}) - 2\gamma(\omega_{23}) - \gamma(\omega_{12}) - \gamma(\omega_{-23}), \\
\alpha &= \sqrt{(\gamma(\omega_{12}) + \gamma(\omega_{23}))^2 + 4(\gamma(\omega_{23}) - \gamma(-\omega_{12}))^2} + \zeta.
\end{aligned}$$

onde

$$\zeta = 4[\gamma(\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{23})](\gamma(-\omega_{12}) - \gamma(\omega_{23})).$$

Analisando os autovalores acima observa-se que mesmo para $T = 0K$ existe apenas um autovalor nulo e a parte real dos demais autovalores é sempre negativa. Logo, o sistema sempre atingirá o estado de equilíbrio predito pela Mecânica Estatística - o estado térmico (6.7).

Resumindo, a análise do modelo de Ising com um campo na direção z mostrou que para $h_z > 2\Delta$ o sistema irá evoluir para o estado de equilíbrio para qualquer valor de temperatura. Por outro lado, para $h_z < 2\Delta$ mostrou-se que embora o sistema possa não atingir o equilíbrio no regime de temperatura zero, o equilíbrio sempre será atingido para qualquer $T > 0$. Uma das diferenças entre os dois regimes de campo é a existência de um estado fundamental degenerado. Essa degenerescência pode ser a responsável por não observarmos a termalização do sistema em $T = 0K$ para $h_z < 2\Delta$. Uma maneira de abordar essa questão é assumir a ação simultânea de dois campos, um na direção z e outro na direção x , quebrando a degenerescência do estado fundamental. Infelizmente mesmo para um sistema de dois spins as expressões das autoenergias e autoestados do Hamiltoniano (6.21) são difíceis de serem manipuladas tornando a dedução da equação mestra muito complicada.

Para contornar esse problema vou deduzir e diagonalizar o superoperador $\hat{\mathcal{L}}_t$ através de métodos numéricos. Para tanto, considerou-se o Hamiltoniano (6.21) com $\Delta = 1$ e $h_z = 1$ de forma tal que a condição $h_z < 2\Delta$ fosse assegurada, garantindo a existência de um estado fundamental degenerado. A temperatura foi fixada em $T = 0K$. Os autovalores de $\hat{\mathcal{L}}_t$ foram calculados para h_x variando no intervalo $[0, 10]$ e os resultados mostraram a existência de um único estado estacionário para todo $h_x > 0$. Logo, quando a degenerescência do estado fundamental é quebrada a termalização ocorre mesmo para $T = 0K$.

6.1.1.3 Reservatório Térmico Comum: $N = 2$ e $N_R = 1$

Até agora os resultados foram obtidos considerando reservatórios térmicos independentes, nosso próximo passo é analisar o comportamento do modelo de Ising quando os spins interagem com um reservatório térmico comum a todos os spins. O Hamiltoniano total (6.19) levando em conta a presença de um único

reservatório térmico é reescrito como:

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \sum_k \omega_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \sum_{j=1}^N \hat{\sigma}_j^x \sum_k g_k \left(\hat{b}_k^\dagger + \hat{b}_k \right), \quad (6.41)$$

onde assumimos que a constante de interação entre os spins e o reservatório g_{kj} é a mesma para todos os spins, i.e., $g_k = g_{kj}$. A diferença entre este caso e o anterior está no operador do sistema que descreve a interação com o reservatório. Antes tínhamos dois operadores mediando a interação $\hat{A}_1 = \hat{\sigma}_1$ e $\hat{A}_2 = \hat{\sigma}_2$, agora há apenas um operador responsável pela interação $\hat{A} = \hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2 = \hat{A}_1 + \hat{A}_2$. Como feito acima, a análise será dividida em dois casos: $h_z < 2\Delta$ e $h_z > 2\Delta$.

Equação Mestra para $h_z < 2\Delta$:

Para $h_z < 2\Delta$ podemos utilizar novamente a base (6.24) para escrever o operador \hat{A} na forma matricial:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.42)$$

Os operadores $\hat{A}(\omega)$ associados as frequências positivas:

$$\omega_{12} = 2\Delta - h_z \quad , \quad \omega_{13} = 2\Delta + h_z \quad , \quad \omega_{23} = 2h_z,$$

são determinados pelas seguintes expressões:

$$\begin{aligned} \hat{A}(\omega_{12}) &= |1\rangle \langle 3| + |2\rangle \langle 3|, \\ \hat{A}(\omega_{13}) &= |1\rangle \langle 4| + |2\rangle \langle 4|, \\ \hat{A}(\omega_{23}) &= 0. \end{aligned}$$

A equação mestra é obtida substituindo esses operadores na equação (6.10):

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{L}}_t \rho(t) = & -i \left[\hat{H}_I, \rho \right] \\
& + \gamma(\omega_{12}) (2|1\rangle \langle 3| \rho |3\rangle \langle 1| - |3\rangle \langle 3| \rho - \rho |3\rangle \langle 3|) \\
& + \gamma(\omega_{12}) (2|3\rangle \langle 3| \rho |3\rangle \langle 2| - |3\rangle \langle 3| \rho - \rho |3\rangle \langle 3|) \\
& + 2\gamma(\omega_{12}) |1\rangle \langle 3| \rho |3\rangle \langle 2| \\
& + 2\gamma(\omega_{12}) |2\rangle \langle 3| \rho |3\rangle \langle 1| \\
& + \gamma(-\omega_{12}) (2|3\rangle \langle 1| \rho |1\rangle \langle 3| - |1\rangle \langle 1| \rho - \rho |1\rangle \langle 1|) \\
& + \gamma(-\omega_{12}) (2|3\rangle \langle 2| \rho |2\rangle \langle 3| - |2\rangle \langle 2| \rho - \rho |2\rangle \langle 2|) \\
& + \gamma(-\omega_{12}) (2|3\rangle \langle 1| \rho |2\rangle \langle 3| - |1\rangle \langle 2| \rho - \rho |1\rangle \langle 2|) \\
& + \gamma(-\omega_{12}) (2|3\rangle \langle 2| \rho |1\rangle \langle 3| - |2\rangle \langle 1| \rho - \rho |2\rangle \langle 1|) \\
& + \gamma(\omega_{13}) (2|1\rangle \langle 4| \rho |4\rangle \langle 1| - |4\rangle \langle 4| \rho - \rho |4\rangle \langle 4|) \\
& + \gamma(\omega_{13}) (2|3\rangle \langle 4| \rho |4\rangle \langle 2| - |4\rangle \langle 4| \rho - \rho |4\rangle \langle 4|) \\
& + 2\gamma(\omega_{13}) |1\rangle \langle 4| \rho |4\rangle \langle 2| \\
& + 2\gamma(\omega_{13}) |2\rangle \langle 4| \rho |4\rangle \langle 1| \\
& + \gamma(-\omega_{13}) (2|4\rangle \langle 1| \rho |1\rangle \langle 4| - |1\rangle \langle 1| \rho - \rho |1\rangle \langle 1|) \\
& + \gamma(-\omega_{13}) (2|4\rangle \langle 2| \rho |2\rangle \langle 4| - |2\rangle \langle 2| \rho - \rho |2\rangle \langle 2|) \\
& + \gamma(-\omega_{13}) (2|4\rangle \langle 1| \rho |2\rangle \langle 4| - |1\rangle \langle 2| \rho - \rho |1\rangle \langle 2|) \\
& + \gamma(-\omega_{13}) (2|4\rangle \langle 2| \rho |1\rangle \langle 4| - |2\rangle \langle 1| \rho - \rho |2\rangle \langle 1|) .
\end{aligned}$$

No que segue apresentamos a representação matricial desta equação mestra:

$$\hat{\mathcal{L}}_t = \begin{pmatrix} C_{2 \times 2}^1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_{2 \times 2}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C_{2 \times 2}^3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{2 \times 2}^4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & D_{1 \times 1}^1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D_{1 \times 1}^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & M_{6 \times 6} \end{pmatrix}_{16 \times 16}, \quad (6.43)$$

com

$$M = \begin{pmatrix} -2\gamma_{12} - 2\gamma_{13} & 0 & 2\gamma_{12} & 2\gamma_{13} & -\gamma_{12} - \gamma_{13} & -\gamma_{12} - \gamma_{13} \\ 0 & -2\gamma_{12} - 2\gamma_{13} & 2\gamma_{12} & 2\gamma_{13} & -\gamma_{12} - \gamma_{13} & -\gamma_{12} - \gamma_{13} \\ 2\gamma_{12} & 2\gamma_{12} & -4\gamma_{12} & 0 & 2\gamma_{12} & 2\gamma_{12} \\ 2\gamma_{13} & 2\gamma_{13} & 0 & -4\gamma_{13} & 2\gamma_{13} & 2\gamma_{13} \\ -\gamma_{12} - \gamma_{13} & -\gamma_{12} - \gamma_{13} & 2\gamma_{12} & 2\gamma_{13} & -2\gamma_{12} - 2\gamma_{13} & 0 \\ -\gamma_{12} - \gamma_{13} & -\gamma_{12} - \gamma_{13} & 2\gamma_{12} & 2\gamma_{13} & 0 & -2\gamma_{12} - 2\gamma_{13} \end{pmatrix},$$

onde utilizou-se a notação $\gamma_{ij} = \gamma(\omega_{ij})$ e $\gamma_{ij}^- = \gamma(-\omega_{ij})$. As matrizes $C_{2 \times 2}^k$ e $D_{1 \times 1}^k$ são dadas por:

$$\begin{aligned} C^1 &= \begin{pmatrix} i\omega_{12} - 2\gamma_{12} - \gamma_{12}^- - \gamma_{13}^- & -\gamma_{12}^- - \gamma_{13}^- \\ -\gamma_{12}^- - \gamma_{13}^- & i\omega_{12} - 2\gamma_{12} - \gamma_{12}^- - \gamma_{13}^- \end{pmatrix}, \\ C^2 &= \begin{pmatrix} i\omega_{13} - 2\gamma_{13} - \gamma_{12}^- - \gamma_{13}^- & -\gamma_{12}^- - \gamma_{13}^- \\ -\gamma_{12}^- - \gamma_{13}^- & i\omega_{13} - 2\gamma_{13} - \gamma_{12}^- - \gamma_{13}^- \end{pmatrix}, \\ C^3 &= \begin{pmatrix} -i\omega_{12} - 2\gamma_{12} - \gamma_{12}^- - \gamma_{13}^- & -\gamma_{12}^- - \gamma_{13}^- \\ -\gamma_{12}^- - \gamma_{13}^- & -i\omega_{12} - 2\gamma_{12} - \gamma_{12}^- - \gamma_{13}^- \end{pmatrix}, \\ C^4 &= \begin{pmatrix} -i\omega_{13} - 2\gamma_{13} - \gamma_{12}^- - \gamma_{13}^- & -\gamma_{12}^- - \gamma_{13}^- \\ -\gamma_{12}^- - \gamma_{13}^- & -i\omega_{13} - 2\gamma_{13} - \gamma_{12}^- - \gamma_{13}^- \end{pmatrix}, \\ D^1 &= i\omega_{23} - \gamma_{12} - \gamma_{13}, \\ D^2 &= -i\omega_{23} - \gamma_{12} - \gamma_{13}. \end{aligned}$$

Nos casos anteriores foi possível determinar o espectro do superoperador $\hat{\mathcal{L}}_t$ para uma temperatura arbitrária. Devido a forma da matriz $M_{6 \times 6}$, a diagonalização desta gera um conjunto de autovalores que torna a análise dos mesmos muito complicada. Para facilitar o nosso trabalho vamos diagonalizar $\hat{\mathcal{L}}_t$ para dois regimes de temperatura: $T = 0K$ e $kT \gg \omega_{12}, \omega_{13}$ (regime de altas temperaturas). Como $\gamma(-\omega) = 0$ para $T = 0K$ as matrizes $C_{2 \times 2}^k$ assumem uma forma diagonal sendo os elementos da diagonal principal números complexos com parte real negativa. Além disso, como D^1 e D^2 também satisfazem essa condição a questão da termalização fica restrita ao comportamento dos autovalores da matriz

$M_{6 \times 6}$, apresentados abaixo:

$$\begin{aligned}\lambda_j &= 0 \quad , j = 1, \dots, 4 \\ \lambda_5 &= -4f(\omega_{12}), \\ \lambda_6 &= -4f(\omega_{13}).\end{aligned}$$

Dado que o autovalor nulo é degenerado, mesmo para um reservatório comum, o modelo de Ising sujeito a condição $h_z < 2\Delta$ continua não termalizando no regime de temperatura zero. Agora, para ver o que acontece no regime de altas temperaturas, $kT \gg \omega_{12}, \omega_{13}$, note que tal condição nos permite assumir $e^{\omega/kT} \approx 1$, justificando a seguinte aproximação:

$$\gamma(\omega) = f(\omega) \left(1 + \frac{1}{e^{\frac{\omega}{kT}} - 1} \right) \approx f(\omega) \frac{1}{e^{\frac{\omega}{kT}} - 1},$$

logo,

$$\gamma(\omega) \approx \gamma(-\omega). \quad (6.44)$$

Utilizando essa aproximação a matriz $M_{6 \times 6}$ torna-se uma matriz simétrica com os seguintes autovalores:

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= -2\gamma(-\omega_{12}) - 2\gamma(-\omega_{13}), \\ \lambda_2 &= -2\gamma(-\omega_{12}) - 2\gamma(-\omega_{13}), \\ \lambda_3 &= -4\gamma(-\omega_{12}) - 4\gamma(-\omega_{13}) + 4\sqrt{(\gamma(-\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{13}))^2 + \gamma(-\omega_{12})\gamma(-\omega_{13})}, \\ \lambda_4 &= -4\gamma(-\omega_{12}) - 4\gamma(-\omega_{13}) - 4\sqrt{(\gamma(-\omega_{12}) - \gamma(-\omega_{13}))^2 + \gamma(-\omega_{12})\gamma(-\omega_{13})}, \\ \lambda_5 &= 0, \\ \lambda_6 &= 0.\end{aligned}$$

Como o autovalor nulo é degenerado, diferente do que foi constatado no caso de reservatórios independentes, se os dois spins interagem com um mesmo reservatório térmico o sistema poderá não termalizar mesmo no regime de altas temperaturas! Embora um tratamento analítico seja muito complicado quando $kT \lesssim \omega_{12}, \omega_{13}$, a diagonalização numérica do superoperador $\hat{\mathcal{L}}_t$ neste intervalo de temperatura indica também a presença de um autovalor nulo degenerado e, portanto, a inexistência de um único estado estacionário. Para completar a nossa análise com respeito ao reservatório comum vamos considerar o caso $h_z > 2\Delta$.

Equação Mestra para $h_z > 2\Delta$:

A representação matricial do operador \hat{A} com relação a base (6.38) é:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.45)$$

Portanto, os operadores $\hat{A}(\omega)$ associados as frequências positivas ω são:

$$\begin{aligned} \hat{A}(\omega_{12}) &= |1\rangle \langle 2| + |1\rangle \langle 3|, \\ \hat{A}(\omega_{23}) &= |2\rangle \langle 4| + |3\rangle \langle 4|, \\ \hat{A}(\omega_{13}) &= 0. \end{aligned}$$

A equação mestra para $h_z > 2\Delta$ é escrita como:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{L}}_t \rho(t) &= -i [\hat{H}_I, \rho] \\ &+ 2\gamma(\omega_{12}) (|1\rangle \langle 2| \rho |2\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 2| \rho |3\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 3| \rho |2\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 3| \rho |3\rangle \langle 1|) \\ &+ 2\gamma(-\omega_{12}) (|2\rangle \langle 1| \rho |1\rangle \langle 2| + |2\rangle \langle 1| \rho |1\rangle \langle 3| + |3\rangle \langle 1| \rho |1\rangle \langle 2| + |3\rangle \langle 1| \rho |1\rangle \langle 3|) \\ &+ 2\gamma(\omega_{23}) (|2\rangle \langle 4| \rho |4\rangle \langle 2| + |2\rangle \langle 4| \rho |4\rangle \langle 3| + |3\rangle \langle 4| \rho |4\rangle \langle 2| + |3\rangle \langle 4| \rho |4\rangle \langle 3|) \\ &+ 2\gamma(-\omega_{23}) (|4\rangle \langle 2| \rho |2\rangle \langle 4| + |4\rangle \langle 2| \rho |3\rangle \langle 4| + |4\rangle \langle 3| \rho |2\rangle \langle 4| + |4\rangle \langle 3| \rho |3\rangle \langle 4|) \\ &- (\gamma(\omega_{12}) + \gamma(-\omega_{23})) (|2\rangle \langle 2| \rho + |2\rangle \langle 3| \rho + |3\rangle \langle 2| \rho + |3\rangle \langle 3| \rho) \\ &- (\gamma(\omega_{12}) + \gamma(-\omega_{23})) (\rho |2\rangle \langle 2| + \rho |2\rangle \langle 3| + \rho |3\rangle \langle 2| + \rho |3\rangle \langle 3| \rho), \end{aligned}$$

que pode ser representada matricialmente da seguinte maneira:

$$\hat{\mathcal{L}}_t = \begin{pmatrix} C_{2 \times 2}^1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_{2 \times 2}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C_{2 \times 2}^3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{2 \times 2}^4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & D_{1 \times 1}^1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D_{1 \times 1}^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & M_{6 \times 6} \end{pmatrix}_{16 \times 16}, \quad (6.46)$$

com

$$M = \begin{pmatrix} -4\gamma_{12} & 2\gamma_{12} & 2\gamma_{12} & 0 & 2\gamma_{12} & 2\gamma_{12} \\ 2\gamma_{12} & -2\gamma_{12} - 2\gamma_{23} & 0 & 2\gamma_{23} & -\gamma_{12} - \gamma_{23} & -\gamma_{12} - \gamma_{23} \\ 2\gamma_{12} & 0 & -2\gamma_{12} - 2\gamma_{23} & 2\gamma_{23} & -\gamma_{12} - \gamma_{23} & -\gamma_{12} - \gamma_{23} \\ 0 & 2\gamma_{23} & 2\gamma_{23} & -4\gamma_{23} & 2\gamma_{23} & 2\gamma_{23} \\ 2\gamma_{12} & -\gamma_{12} - \gamma_{23} & -\gamma_{12} - \gamma_{23} & 2\gamma_{23} & -2\gamma_{12} - 2\gamma_{23} & 0 \\ 2\gamma_{12} & -\gamma_{12} - \gamma_{23} & -\gamma_{12} - \gamma_{23} & 2\gamma_{23} & 0 & -2\gamma_{12} - 2\gamma_{23} \end{pmatrix}.$$

Neste momento, as formas das matrizes $C_{2 \times 2}^k$ e $D_{1 \times 1}^k$ não serão importantes para discutir a termalização do modelo de Ising. Conforme o caso anterior, para $h_z < 2\Delta$, só foi possível encontrar expressões tratáveis dos autovalores nos limites de temperatura zero e altas temperaturas. Por outro lado, para $h_z > 2\Delta$ os autovalores referentes a matriz $M_{6 \times 6}$ possuem uma forma simples, nos permitindo analisar se o superoperador $\hat{\mathcal{L}}_t$ possui um ou mais estados estacionários para qualquer T . O autovalores da matriz $M_{6 \times 6}$ estão apresentados abaixo:

$$\lambda_1 = -2\gamma_{12} - \gamma_{23},$$

$$\lambda_2 = -2\gamma_{12} - \gamma_{23},$$

$$\lambda_3 = \eta + \alpha,$$

$$\lambda_4 = \eta - \alpha,$$

$$\lambda_5 = 0,$$

$$\lambda_6 = 0,$$

com

$$\eta = -2(\gamma_{12} + \gamma_{12} + \gamma_{23} + \gamma_{23}),$$

$$\alpha = 2\sqrt{(\gamma_{12} - \gamma_{23})^2 + (\gamma_{12} - \gamma_{23})^2 + 2\gamma_{12}(\gamma_{12} - \gamma_{23}) + 2\gamma_{23}(\gamma_{12} + \gamma_{23})}.$$

Segundo estas expressões, não haverá um único estado estacionário associado a dinâmica da equação mestra anterior, tendo em vista que o autovalor nulo é degenerado. É importante destacar que esse resultado é válido para qualquer valor de temperatura. Comparando este resultado com aquele obtido para reservatórios independentes, observa-se um grande contraste. Para reservatórios independentes o sistema termaliza mesmo para $T = 0K$, enquanto que para

um único reservatório o sistema não termaliza independente da temperatura do reservatório. Este resultado serve para mostrar que o fato do sistema apresentar um único estado estacionário não depende apenas da degenerescência do estado fundamental, mesmo para $T = 0K$. Aqui temos um exemplo de um sistema com estado fundamental não-degenerado que não termaliza em $T = 0K$.

Como no caso de reservatórios independentes, não foi possível realizar um estudo analítico na presença de dois campos, h_x e h_z . Entretanto, a diagonalização numérica indica que o sistema continua não termalizando mesmo para $h_x \neq 0$ e $h_z \neq 0$. Para tanto fixamos $\Delta = 1$ e variou-se ambos os campos no intervalo $[-10, 10]$. Isso foi feito para distintas temperaturas: $T = 0.1, 0.5, 5.0, 10.0, 20.0$. Em todos os casos foram encontrados pelo menos dois autovalores nulos.

6.1.1.4 Caso $N > 2$ com N_R arbitrário

Os casos estudados até este ponto ficaram restritos a condição $N = 2$. Para $N > 2$ o uso da equação mestra impõe severas dificuldades mesmo no âmbito da análise numérica. Uma maneira alternativa para mostrar que um sistema possui dois ou mais estados estacionários é encontrar uma constante de movimento ao sistema composto $S + R$, um operador que comute com o Hamiltoniano $\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_R + \hat{H}_{SR}$. Para o modelo Ising (6.21) com $N = 2$ e $h_z = 0$ tal constante de movimento é dada pelo operador $\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x$, como demonstrado no início da seção 6.1.1.1. Para demonstrar isso foi fundamental supor que o operador do sistema que descreve a interação sistema-reservatório era de forma $\hat{A}_j = \hat{\sigma}_j^x$. Este resultado pode ser facilmente generalizado para um $N \geq 2$ qualquer. Neste caso, a constante de movimento é definida pelo operador $\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \dots \hat{\sigma}_N^x$.

Para demonstrar esta afirmação note primeiramente que $[\hat{\sigma}_1^x \dots \hat{\sigma}_N^x, \hat{H}_{SR}] = 0$, pois $[\hat{\sigma}_1^x \dots \hat{\sigma}_N^x, \hat{A}_j] = 0$ com $\hat{A}_j = \hat{\sigma}_j^x$. Agora, $\hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \dots \hat{\sigma}_N^x$ será uma constante de movimento se $[\hat{\sigma}_1^x \dots \hat{\sigma}_N^x, \hat{H}] = [\hat{\sigma}_1^x \dots \hat{\sigma}_N^x, \hat{H}_S] = 0$. Isso é verificado abaixo:

$$\begin{aligned}
[\hat{\sigma}_1^x \dots \hat{\sigma}_N^x, \hat{H}_S] &= [\hat{\sigma}_1^x \dots \hat{\sigma}_N^x, \Delta \sum_{j=1}^{N-1} \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z] - [\hat{\sigma}_1^x \dots \hat{\sigma}_N^x, h_x \sum_{j=1}^{N-1} \hat{\sigma}_j^x] \\
&= \Delta \sum_{j=1}^{N-1} [\hat{\sigma}_1^x \dots \hat{\sigma}_{j-1}^x \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x \hat{\sigma}_{j+2}^x \dots \hat{\sigma}_N^x, \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z] \\
&= \Delta \sum_{j=1}^{N-1} \hat{\sigma}_1^x \dots \hat{\sigma}_{j-1}^x \hat{\sigma}_{j+2}^x \dots \hat{\sigma}_N^x [\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x, \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z],
\end{aligned}$$

segue do resultado para dois spins que $[\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x, \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z] = 0$. Logo,

$$[\hat{\sigma}_1^x \dots \hat{\sigma}_N^x, \hat{H}_S] = 0.$$

Este resultado mostra que o estado o modelo de Ising no campo transversal interagindo com um reservatório térmico nem sempre será descrito pelo *ensemble* de Gibbs. Além disso, a validade do resultado independe do número de spins.

6.1.2 Equação Mestra para Hamiltonianos com *gaps* não-degenerados

Nas seções anteriores estudamos a existência de estados estacionários associados a equação mestra de uma cadeia de spins interagentes descrita pelo modelo de Ising. No caso de reservatórios independentes observamos que a presença de um estado fundamental degenerado implicava na inexistência de um único estado estacionário em $T = 0K$. Por outro lado, quando investigamos a interação dos dois spins com um único reservatório térmico, mostramos que mesmo com um estado fundamental não-degenerado, a dinâmica proveniente da equação mestra no regime de temperatura nula poderia levar a distintos estados estacionários. Neste caso, uma possível interação efetiva entre os spins, devido ao acoplamento de ambos com o mesmo reservatório²⁰, poderia ser responsável por impedir que o sistema evoluísse para o estado de menor energia mesmo para $T = 0K$. No entanto, como será demonstrado na próxima seção, a interação com reservatórios independentes também pode acarretar na existência de distintos

²⁰Por exemplo, se dois átomos que não interagem entre si estiverem na presença de um campo eletromagnético quântico, atuando sobre ambos os átomos, pode ocorrer deste campo gerar uma interação efetiva entre os átomos. Portanto, efetivamente, teríamos um sistema de dois átomos interagentes [154].

estados estacionários mesmo se o espectro do Hamiltoniano do sistema for não-degenerado e a temperatura do reservatório for igual a zero. Para demonstrar este resultado faremos uso da equação mestra que será deduzida na sequência.

Nesta seção vamos assumir que o Hamiltoniano \hat{H}_S que descreve o sistema de interesse não possui *gaps* de energia degenerados, ou seja, para quaisquer quatro autoestados com energias $\epsilon_k, \epsilon_l, \epsilon_n$ e ϵ_m , se $\epsilon_k - \epsilon_l = \epsilon_m - \epsilon_n$ então $k = l$ e $m = n$ ou $k = m$ e $l = n$. Note que isso implica também que os níveis de energia não são degenerados. Como discutido por N. Linden *et al.* [137], esta condição implica na impossibilidade de dividir o sistema em dois subsistemas não-interagentes. Ainda segundo os autores, essa suposição seria natural na modelagem de sistemas físicos, pois as degenerescências associadas a um dado Hamiltoniano podem ser removidas adicionando a este uma pequena perturbação aleatória. Por exemplo, o modelo de Ising sujeito a um campo externo na direção z (ou na direção x) não satisfaz tal condição, mas a adição de campos em outras direções (tratados perturbativamente) poderiam eliminar os *gaps* de energia presentes no Hamiltoniano original. É importante ressaltar que nesta seção o Hamiltoniano \hat{H}_S é qualquer Hamiltoniano que satisfaz a condição anterior, não se restringindo apenas aqueles que descrevem a interação entre spins.

Com o espectro de energia ordenado, $\epsilon_1 < \epsilon_2 < \dots < \epsilon_M$ onde M é o número de autovalores de \hat{H}_S , a frequência $\omega_{ij} = \epsilon_j - \epsilon_i$ será positiva se $j > i$. Com isso, os operadores $\hat{A}_k(\omega)$ associados as frequências positivas são dados por:

$$\hat{A}_k(\omega_{ij}) = |i\rangle \langle i| \hat{A}_k |j\rangle \langle j| = \Pi_{ii} \hat{A}_k \Pi_{jj}, \quad (6.47)$$

onde $|i\rangle$ é o autoestado associado a energia ϵ_i e $\Pi_{ii} = |i\rangle \langle i|$. Lembre que \hat{A}_k é um operador hermitiano associado ao sistema e descreve a interação com o k -ésimo reservatório térmico. Neste momento não vamos assumir nenhuma forma particular para \hat{A}_k . Usando os operadores $\hat{A}_k(\omega_{ij})$ definidos por (6.47), a equação mestra (6.10) pode ser reescrita como:

$$\mathcal{L}_t(\rho) = -i \left[\hat{H}_S, \rho \right] + \hat{\mathcal{L}}(\rho),$$

onde o termo não-unitário é:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(\rho) &= \sum_{n=1}^{N_R} \gamma(0) [2A_n(0)\rho(t)A_n^\dagger(0) - A_n^\dagger(0)A_n(0)\rho - \rho A_n^\dagger(0)A_n(0)] \\
&+ \sum_{n=1}^{N_R} \sum_{\omega>0} \gamma(\omega) [2A_n(\omega)\rho(t)A_n^\dagger(\omega) - A_n^\dagger(\omega)A_n(\omega)\rho - \rho A_n^\dagger(\omega)A_n(\omega)] \\
&+ \sum_{n=1}^{N_R} \sum_{\omega>0} \gamma(-\omega) [2A_n^\dagger(\omega)\rho(t)A_n(\omega) - A_n(\omega)A_n^\dagger(\omega)\rho - \rho A_n(\omega)A_n^\dagger(\omega)] \\
&= \sum_{n=1}^{N_R} \gamma(0) [2A_n(0)\rho(t)A_n^\dagger(0) - A_n^\dagger(0)A_n(0)\rho - \rho A_n^\dagger(0)A_n(0)] \\
&+ \sum_{n=1}^{N_R} \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M \gamma(\omega_{ij}) [2A_n(\omega_{ij})\rho A_n^\dagger(\omega_{ij}) - A_n^\dagger(\omega_{ij})A_n(\omega_{ij})\rho - \rho A_n^\dagger(\omega_{ij})A_n(\omega_{ij})] \\
&+ \sum_{n=1}^{N_R} \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M \gamma(-\omega_{ij}) [2A_n^\dagger(\omega_{ij})\rho A_n(\omega_{ij}) - A_n(\omega_{ij})A_n^\dagger(\omega_{ij})\rho - \rho A_n(\omega_{ij})A_n^\dagger(\omega_{ij})\rho] \\
&= 2 \sum_{i,j=1}^M \sum_{n=1}^{N_R} \gamma(0) A_{ii}^n A_{jj}^n \rho_{ij} \Pi_{ij} - \sum_{i=1}^M \sum_{n=1}^{N_R} \gamma(0) A_{ii}^n A_{ii}^n (\rho \Pi_{ii} + \Pi_{ii} \rho) \\
&+ \sum_{n=1}^{N_R} \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M \gamma(\omega_{ij}) A_{ij}^n A_{ji}^n [2\rho_{jj} \Pi_{ii} - \Pi_{jj} \rho - \rho \Pi_{jj}] \\
&+ \sum_{n=1}^{N_R} \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M \gamma(-\omega_{ij}) A_{ij}^n A_{ji}^n [2\rho_{ii} \Pi_{jj} - \Pi_{ii} \rho - \rho \Pi_{ii}] \\
&= 2 \sum_{i,j=1}^M F_{ij} \rho_{ij} \Pi_{ij} - \sum_{i=1}^M F_{ii} (\rho \Pi_{ii} + \Pi_{ii} \rho) \\
&+ \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M B_{ij} [2\rho_{jj} \Pi_{ii} - \Pi_{jj} \rho - \rho \Pi_{jj}] \\
&+ \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M \tilde{B}_{ij} [2\rho_{ii} \Pi_{jj} - \Pi_{ii} \rho - \rho \Pi_{ii}]
\end{aligned}$$

com $F_{ij} = \sum_{n=1}^{N_R} \gamma(0) A_{ii}^n A_{jj}^n$, $B_{ij} = \sum_{n=1}^{N_R} \gamma(\omega_{ij}) A_{ij}^n A_{ji}^n$ e $\tilde{B}_{ij} = \sum_{n=1}^{N_R} \gamma(-\omega_{ij}) A_{ij}^n A_{ji}^n$, onde $A_{ij}^n = \langle i | \hat{A}_n | j \rangle$.

O superoperador \mathcal{L}_t associado a esta equação mestra pode ser representado matricialmente da seguinte maneira²¹:

$$\mathcal{L}_t = \begin{pmatrix} D_{q \times q} & 0 & 0 \\ 0 & D_{q \times q}^* & 0 \\ 0 & 0 & \Lambda_{M \times M} \end{pmatrix}_{M^2 \times M^2}, \quad (6.48)$$

²¹Para maiores detalhes consultar o Apêndice B

onde $q = \frac{M(M-1)}{2}$ e o simbolo “*” denota o complexo conjugado. A matriz $D_{q \times q} = \text{diag}(d_{12}, d_{13}, \dots, d_{km}, \dots, d_{M-1M})$ é diagonal e os seus autoestados são obtidos através da expressão:

$$d_{km} = i\omega_{km} + 2F_{km} - F_{kk} - F_{mm} - \sum_{\substack{i=1 \\ k>1}}^{k-1} B_{ik} - \sum_{\substack{i=1 \\ m>1}}^{m-1} B_{im} - \sum_{\substack{i=k+1 \\ k<M}}^M \tilde{B}_{kj} - \sum_{\substack{i=m+1 \\ m<M}}^M \tilde{B}_{mj}, \quad (6.49)$$

com $k, m = 1, 2, \dots, M$ tal que $k < m$. A matriz $\Lambda_{M \times M}$ é dada por:

$$\Lambda = 2 \begin{pmatrix} \Lambda_{11} & B_{12} & B_{13} & B_{14} & \dots & B_{1M-1} & B_{1M} \\ \tilde{B}_{21} & \Lambda_{22} & B_{23} & B_{24} & \dots & B_{2M-1} & B_{2M} \\ \tilde{B}_{31} & \tilde{B}_{32} & \Lambda_{33} & B_{34} & \dots & B_{3M-1} & B_{3M} \\ \tilde{B}_{41} & \tilde{B}_{42} & \tilde{B}_{43} & \Lambda_{4,4} & \dots & B_{3,M-1} & B_{3M} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \\ \tilde{B}_{M1} & \tilde{B}_{M2} & \tilde{B}_{M3} & \tilde{B}_{M4} & \dots & \tilde{B}_{MM-1} & \Lambda_{MM} \end{pmatrix}_{M \times M}, \quad (6.50)$$

onde os elementos da diagonal principal são determinados pelas seguintes expressões:

$$\begin{aligned} \Lambda_{11} &= - \sum_{j=2}^M \tilde{B}_{1j}, \\ \Lambda_{mm} &= - \sum_{i=1}^{m-1} B_{im} - \sum_{i=m+1}^M \tilde{B}_{mi}, \quad 1 < m < M \\ \Lambda_{MM} &= - \sum_{i=2}^{M-1} B_{iM}. \end{aligned} \quad (6.51)$$

Como havíamos discutido anteriormente, um dos problemas envolvidos no cálculo dos autovalores do superoperador \mathcal{L}_t reside na dimensão da matriz que o representa, neste caso $M^2 \times M^2$. Por outro lado, o resultado acima implica que para Hamiltonianos com *gaps* não-degenerados o problema da diagonalização de \mathcal{L}_t se reduz ao cálculo dos autovalores de uma matriz quadrada Λ com dimensão $M \times M$, simplificando consideravelmente o cálculo dos autovalores de \mathcal{L}_t . Além disso, a forma matricial de \mathcal{L}_t permite determinar a dinâmica das coerências do operador densidade $\rho(t)$, usando a equação (6.49):

$$\rho_{k,m}(t) = e^{d_{km}t} \rho_{k,m}(0), \quad (6.52)$$

com $k, m = 1, 2, \dots, M$ tal que $k < m$. As coerências $\rho_{m,k}(t)$ com $k > m$ são determinadas pela relação $\rho_{m,k}(t) = \rho_{k,m}(t)^*$. Como $\omega_{ij} \neq 0$ tem-se que $\text{Im}(d_{km}) \neq 0$ e portanto a dinâmica de $\rho_{k,m}(t)$ sempre terá uma componente oscilatória. Agora, para mostrar que $B_{ij} \geq 0$ e $\tilde{B}_{ij} \geq 0$ note que:

$$\begin{aligned} B_{ij} &= \sum_{n=1}^{N_R} \gamma(\omega_{ij}) A_{ij}^n A_{ji}^n = \sum_{n=1}^{N_R} \gamma(\omega_{ij}) \langle i | \hat{A}^n | j \rangle \langle j | \hat{A}^n | i \rangle, \\ &= \sum_{n=1}^{N_R} \gamma(\omega_{ij}) \left| \langle i | \hat{A}^n | j \rangle \right|^2 \geq 0, \end{aligned}$$

onde uso-se o fato de $\gamma(\omega_{ij}) \geq 0$ e $(\hat{A}_n)^\dagger = \hat{A}_n$. Como \tilde{B}_{ij} pode ser obtido de B_{ij} fazendo $\gamma(\omega_{ij}) \rightarrow \gamma(-\omega_{ij})$ segue que $\tilde{B}_{ij} \geq 0$. Outro ponto importante diz respeito aos autovalores nulos do superoperador \mathcal{L}_t . Como $\omega_{ij} \neq 0$ implica em $d_{ij} \neq 0$, os autovalores nulos estão associados exclusivamente com a diagonalização da matriz Λ .

No caso de $T = 0K$ tem-se que $\gamma(-\omega_{ij}) = 0$ implicando em $\tilde{B}_{ij} = 0$. Note que nesta situação a matriz Λ reduz-se a uma matriz triangular superior, pois todos os elementos abaixo da diagonal principal são nulos. Portanto, como os autovalores de uma matriz triangular coincidem com os elementos da diagonal principal, os autovalores de Λ são:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 0, \\ \lambda_m &= -2 \sum_{i=1}^{m-1} B_{im}, \quad 1 < m < M \\ \lambda_M &= -2 \sum_{i=2}^{M-1} B_{iM}, \end{aligned} \tag{6.53}$$

onde pode-se observar a existência de um autovalor nulo independente da forma dos operadores \hat{A}_n e do número de reservatórios N_R .

6.1.3 Modelo XXZ

O modelo XXZ na presença de dois campos externos, nas direções x e z , é descrito pelo Hamiltoniano (6.16) com $J_x = J_y = 1$. Impondo esta condição o

Hamiltoniano deste modelo assume a seguinte forma:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{xxz} &= \sum_{j=1}^{N-1} (\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x + \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y + \Delta \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z) - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (h_x \hat{\sigma}_j^x + h_z \hat{\sigma}_j^z), \\ &= \sum_{j=1}^{N-1} (\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x + \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y) + \hat{H}_I(N, \Delta, h_x, h_z),\end{aligned}\quad (6.54)$$

onde $\hat{H}_I(N, \Delta, h_x, h_z)$ é o Hamiltoniano de Ising.

Usando o mesmo procedimento da seção 6.1.1.4 pode-se demonstrar que o Hamiltoniano total $\hat{H} = \hat{H}_{xxz} + \hat{H}_R + \hat{H}_{SR}$ também comuta com o operador $\hat{\sigma}_1^x \dots \hat{\sigma}_N^x$ para N e N_R arbitrários e $h_z = 0$, no caso em que $\hat{A}_j = \hat{\sigma}_j^x$. Para provar isso basta mostrar que o comutador:

$$\sum_{j=1}^{N-1} [\hat{\sigma}_1^x \dots \hat{\sigma}_N^x, \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y], \quad (6.55)$$

é igual a zero, pois como visto anteriormente

$$\left[\hat{H}_I(N, \Delta, h_x, 0) + \hat{H}_R + \hat{H}_{SR}, \hat{\sigma}_1^x \dots \hat{\sigma}_N^x \right] = 0.$$

Efetuadao o cálculo do comutador (6.55):

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{N-1} [\hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y, \hat{\sigma}_1^x \dots \hat{\sigma}_N^x] &= \sum_{j=1}^{N-1} [\hat{\sigma}_1^x \dots \hat{\sigma}_{j-1}^x \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x \hat{\sigma}_{j+2}^x \dots \hat{\sigma}_N^x, \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y] \\ &= \sum_{j=1}^{N-1} \hat{\sigma}_1^x \dots \hat{\sigma}_{j-1}^x \hat{\sigma}_{j+2}^x \dots \hat{\sigma}_N^x [\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x, \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y],\end{aligned}$$

como

$$\begin{aligned}[\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x, \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y] &= \hat{\sigma}_j^y [\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x, \hat{\sigma}_{j+1}^y] + [\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x, \hat{\sigma}_j^y] \hat{\sigma}_{j+1}^y \\ &= \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_j^x [\hat{\sigma}_{j+1}^x, \hat{\sigma}_{j+1}^y] + [\hat{\sigma}_j^x, \hat{\sigma}_j^y] \hat{\sigma}_{j+1}^x \hat{\sigma}_{j+1}^y \\ &= \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_j^x (2i \hat{\sigma}_{j+1}^z) + (2i \hat{\sigma}_{j+1}^z) \hat{\sigma}_{j+1}^x \hat{\sigma}_{j+1}^y \\ &= 2 \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z - 2 \hat{\sigma}_{j+1}^z \hat{\sigma}_j^z \\ &= 0,\end{aligned}$$

tem-se que

$$\sum_{j=1}^{N-1} [\hat{\sigma}_1^x \dots \hat{\sigma}_N^x, \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y] = 0. \quad (6.56)$$

Portanto, a dinâmica do modelo XXZ com um campo na direção x acoplado a N_R reservatórios não possui um único estado estacionário, independente do estado de cada reservatório²². Por outro lado, como no modelo de Ising, a ação de um campo na direção z implica que $[\hat{\sigma}_1^x \dots \hat{\sigma}_N^x, \hat{H}_{xxz}] \neq 0$, logo não se pode afirmar nada sobre a existência de um único estado estacionário. Para investigar esse ponto vamos voltar a empregar o formalismo da equação mestra, restringindo o nosso estudo ao caso de dois spins interagentes.

6.1.3.1 Reservatórios Independentes: $N_R = 2$

Inicialmente vamos desconsiderar a ação do campo na direção x . A diagonalização do Hamiltoniano \hat{H}_{xxz} assumindo $h_x = 0$ resulta nos seguintes autovalores e autoestados:

$$\begin{aligned}
 E_1 &= -\Delta - 2 & \text{com} & & |E_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle) \\
 E_2 &= -\Delta + 2 & \text{com} & & |E_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle), \\
 E_3 &= \Delta + h_z & \text{com} & & |E_3\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle, \\
 E_4 &= \Delta - h_z & \text{com} & & |E_4\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle.
 \end{aligned} \tag{6.57}$$

Tanto a ordenação quanto a degenerescência dos autovalores dependem dos valores de Δ e h_z . Primeiramente, existem dois regimes que devem ser separados: $h_z < 2$ e $h_z > 2$. No que segue vamos assumir $h_z < 2$, resultando no ordenamento dos autovalores exibido na tabela abaixo.

$\Delta < -1 - \frac{h_z}{2}$	$-1 - \frac{h_z}{2} < \Delta < \frac{h_z}{2} - 1$	$\frac{h_z}{2} - 1 < \Delta < 1 - \frac{h_z}{2}$	$1 - \frac{h_z}{2} < \Delta < 1 + \frac{h_z}{2}$	$\Delta > 1 + \frac{h_z}{2}$
E_2	E_2	E_2	E_3	E_3
E_1	E_3	E_3	E_2	E_4
E_3	E_1	E_4	E_4	E_2
E_4	E_4	E_1	E_1	E_1

TABELA 6.1: Os autovalores estão ordenados de baixo para cima, do menor para o maior. Nos extremos dos intervalos o espectro do Hamiltoniano \hat{H}_{xxz} torna-se degenerado.

Para valores de Δ pertencentes aos intervalos expostos na Tabela (6.1) e para $\Delta \notin \left\{-1, 0, 1, -\frac{3h_z}{2} - 1, -\frac{h_z}{2} - 3, \frac{3h_z}{2} + 1, \frac{h_z}{2} + 3\right\}$, a condição de *gaps*

²²Lembre que no caso de múltiplos reservatórios estamos assumindo a inexistência de correlações entre eles, tanto correlações clássicas quanto quânticas.

não-degenerados é satisfeita pelo Hamiltoniano²³ \hat{H}_{xxz} . Dessa forma, a dinâmica do modelo XXZ, neste regime de parâmetros, pode ser estudada através do superoperador $\hat{\mathcal{L}}_t$, dado pela equação (6.48). No entanto, como o ordenamento dos autovalores muda de um intervalo para outro, a dinâmica do sistema será distinta dentro de cada intervalo de variação de Δ , ou seja, o superoperador $\hat{\mathcal{L}}_t$ depende da região em que Δ se encontra. Além disso, o termo referente a $\gamma(0)$ não contribui para a dinâmica pois, com relação aos autoestados (6.57), tem-se que $A_{ii}^n = 0$, logo $F_{ij} = 0$. Neste caso, a parte real da equação (6.49) será sempre menor ou igual a zero.

Inicialmente vamos focar nossa atenção no regime de $T = 0K$. Para verificar a degenerescência do autovalor nulo associado ao superoperador $\hat{\mathcal{L}}_t$ basta calcular os coeficientes B_{ij} , que determinam os autovalores da matriz Λ :

$$\Lambda = 2 \begin{pmatrix} \Lambda_{11} & B_{12} & B_{13} & B_{14} \\ 0 & \Lambda_{22} & B_{23} & B_{24} \\ 0 & 0 & \Lambda_{33} & B_{34} \\ 0 & 0 & 0 & \Lambda_{4,4} \end{pmatrix}_{4 \times 4}, \quad (6.58)$$

que coincidem com os elementos da diagonal principal desta matriz:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 0, \\ \lambda_2 &= -2B_{12}, \\ \lambda_3 &= -2B_{13} - 2B_{23}, \\ \lambda_4 &= -2B_{24} - 2B_{34}, \end{aligned} \quad (6.59)$$

onde

$$B_{ij} = \sum_{n=1}^{N_R} \gamma(\omega_{ij}) A_{ij}^n A_{ji}^n = f(\omega_{ij}) \left(|A_{ij}^1|^2 + |A_{ij}^2|^2 \right) = f(\omega_{ij}) C_{ij}, \quad (6.60)$$

com $A_{ij}^k = \langle i | \hat{A}_k | j \rangle$ e $\hat{A}_k = \hat{\sigma}_k^x$. Como já mencionado, cada intervalo de variação de Δ exibido na tabela (6.1) corresponde a um dado ordenamento dos autovalores $\{E_1, E_2, E_3, E_4\}$. Por exemplo, para $\Delta > 1 + h_z/2$ tem-se o seguinte ordenamento: $E_1 < E_2 < E_4 < E_3$. Para evitar confusões no momento de utilizar os resultados

²³No entanto, é possível calcular a dinâmica do sistema para os valores de Δ que não satisfazem essa condição como nos casos anteriores, em que o espectro apresentava degenerescências.

da seção anterior é conveniente renomear os autovalores (6.57) dentro de cada intervalo. Adotando a notação da seção anterior tem-se que, para $\Delta > 1 + h_z/2$, os autoestados são renomeados como:

$$\epsilon_1 \leftrightarrow E_1 \quad , \quad \epsilon_2 \leftrightarrow E_2 \quad , \quad \epsilon_3 \leftrightarrow E_4 \quad , \quad \epsilon_4 \leftrightarrow E_3, \quad (6.61)$$

consequentemente os autoestados também serão renomeados:

$$|1\rangle \leftrightarrow |E_1\rangle \quad , \quad |2\rangle \leftrightarrow |E_2\rangle \quad , \quad |3\rangle \leftrightarrow |E_4\rangle \quad , \quad |4\rangle \leftrightarrow |E_3\rangle. \quad (6.62)$$

Os valores dos coeficientes C_{ij} (que determinam B_{ij}) para os distintos intervalos de variação de Δ estão apresentados na tabela (6.2). Analisando os resultados apresentados nesta tabela observa-se o seguinte: para $\Delta < -1 - \frac{h_z}{2}$ e $\Delta > 1 + \frac{h_z}{2}$ tem-se $C_{12} = 0$ e portanto $\lambda_2 = 0$. Logo, para tais valores de Δ o superoperador $\hat{\mathcal{L}}_t$ apresenta um autovalor nulo degenerado, ou seja, *não* existe uma única solução estacionária. É importante notar que este comportamento assintótico ocorre para valores de Δ que asseguram um espectro de energia livre de degenerescências. Quando estudamos o modelo de Ising no regime de temperatura zero, observamos distintos estados estacionários apenas quando o estado fundamental era degenerado. Outro ponto interessante é o fato do sistema estar submetido a interação com reservatórios independentes. Este resultado referente aos estados estacionários do modelo XXZ oferece duas informações: 1) a termalização em $T = 0K$ pode não ocorrer mesmo para reservatórios independentes e 2) a ausência de termalização nem sempre está associada com as degenerescências do espectro de energia do sistema.

Por outro lado, se Δ assumir valores fora dos intervalos $\Delta < -1 - \frac{h_z}{2}$ e $\Delta > 1 + \frac{h_z}{2}$, o superoperador $\hat{\mathcal{L}}_t$ apresentará apenas um autovalor nulo e portanto o sistema sempre evoluirá para o estado térmico. Um fato curioso diz respeito ao intervalo de termalização - os valores de Δ que asseguram a evolução para o equilíbrio térmico. Note que para $0 < h_z \ll 1$ este intervalo tende ao intervalo $(-1, 1)$, ou seja, para campos muito fracos a região de termalização é limitada pelos dois pontos críticos do modelo XXZ. Porém, conforme o campo aumenta os limites do intervalo de termalização não coincidem com os pontos críticos em $T = 0K$, lembrando que o campo não pode ser muito intenso pois assumimos

$h_z < 2$. No caso $h_z = 0$ mostramos anteriormente que o sistema pode não evoluir para *ensemble* de Gibbs, independente da temperatura do reservatório T e do número de spins N .

	$\Delta < -1 - \frac{h_z}{2}$	$-1 - \frac{h_z}{2} < \Delta < \frac{h_z}{2} - 1$	$\frac{h_z}{2} - 1 < \Delta < 1 - \frac{h_z}{2}$	$1 - \frac{h_z}{2} < \Delta < 1 + \frac{h_z}{2}$	$\Delta > 1 + \frac{h_z}{2}$
C_{12}	0	1	1	1	0
C_{13}	1	0	1	0	1
C_{14}	1	1	0	1	1
C_{23}	1	1	0	1	1
C_{24}	1	0	1	0	1
C_{34}	0	1	1	1	0

TABELA 6.2: Coeficientes C_{ij} em função do intervalo de variação de Δ . Estes resultados **não** são válidos para $\Delta \in \{-1, 0, 1, -\frac{3h}{2} - 1, -\frac{h}{2} - 3\}$ e $\Delta \in \{\frac{3h}{2} + 1, \frac{h}{2} + 3\}$.

Para verificar o que ocorre com a dinâmica do sistema para valores de Δ na região com distintos estados estacionários precisamos resolver o seguinte sistema de equações diferenciais acopladas, obtido por meio da matriz Λ :

$$\begin{pmatrix} \dot{\rho}_{1,1} \\ \dot{\rho}_{2,2} \\ \dot{\rho}_{3,3} \\ \dot{\rho}_{4,4} \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & f(\omega_{13}) & f(\omega_{14}) \\ 0 & 0 & f(\omega_{23}) & f(\omega_{24}) \\ 0 & 0 & \Lambda_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Lambda_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{1,1} \\ \rho_{2,2} \\ \rho_{3,3} \\ \rho_{4,4} \end{pmatrix}, \quad (6.63)$$

que descreve a dinâmica das populações do operador densidade do sistema ρ na base (6.62). Note que este sistema de equações acopladas possui a mesma estrutura apresentada por (6.33), referente ao modelo de Ising. Logo, os elementos $\rho_{i,i}(t)$ são determinados pelas equações:

$$\begin{aligned} \rho_{1,1}(t) &= \rho_{1,1}(0) + \frac{1}{2} (1 - e^{-2f(\omega_{24})t}) \rho_{4,4}(0) \\ &+ \frac{f(\omega_{13})}{2(f(\omega_{13}) + f(\omega_{23}))} (1 - e^{-2(f(\omega_{13})+f(\omega_{23}))t}) \rho_{3,3}(0), \end{aligned} \quad (6.64)$$

$$\begin{aligned} \rho_{2,2}(t) &= \rho_{2,2}(0) + \frac{1}{2} (1 - e^{-2f(\omega_{24})t}) \rho_{4,4}(0) \\ &+ \frac{f(\omega_{23})}{2(f(\omega_{13}) + f(\omega_{23}))} (1 - e^{-2(f(\omega_{13})+f(\omega_{23}))t}) \rho_{3,3}(0), \end{aligned}$$

$$\rho_{3,3}(t) = e^{-2(f(\omega_{13})+f(\omega_{23}))t} \rho_{3,3}(0),$$

$$\rho_{4,4}(t) = e^{-2f(\omega_{24})t} \rho_{4,4}(0).$$

A dinâmica das coerências é dada pela equação (6.52). Analisando os valores de d_{km} com base na tabela (6.2) nota-se que $\text{Re}(d_{km}) < 0$ exceto para d_{12} (e seu complexo conjugado d_{21}), pois $\text{Re}(d_{12}) = 0$. Portanto, para tempos longos, $t \gg 1/f(\omega_{ij})$, apenas a coerência entre os estados $|1\rangle$ e $|2\rangle$, determinada pela equação:

$$\rho_{1,2}(t) = e^{i\omega_{12}t} \rho_{1,2}(0), \quad (6.65)$$

contribuirá para a dinâmica do sistema, se a condição inicial for tal que $\rho_{1,2}(0) \neq 0$. Além disso, para $t \rightarrow \infty$ as equações (6.64) assumem a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \rho_{1,1}(t \rightarrow \infty) &= \rho_{1,1}(0) + \frac{1}{2}\rho_{4,4}(0) + \frac{f(\omega_{13})}{2(f(\omega_{13}) + f(\omega_{23}))}\rho_{3,3}(0), \\ \rho_{2,2}(t \rightarrow \infty) &= \rho_{2,2}(0) + \frac{1}{2}\rho_{4,4}(0) + \frac{f(\omega_{23})}{2(f(\omega_{13}) + f(\omega_{23}))}\rho_{3,3}(0), \\ \rho_{3,3}(t \rightarrow \infty) &= 0, \\ \rho_{4,4}(t \rightarrow \infty) &= 0. \end{aligned} \quad (6.66)$$

Estes resultados revelam que para tempos longos, $t \gg 1/f(\omega_{ij})$, apenas o estado fundamental $|1\rangle$ e o primeiro estado excitado $|2\rangle$ serão populados. Note também que se $\rho_{1,2}(0) \neq 0$ o sistema não atingirá o estado estacionário, pois $\rho_{1,2}(t)$ exibe um comportamento oscilatório. Outra característica interessante diz respeito a evolução para o estado fundamental. Poderíamos pensar que como a temperatura do reservatório é nula, o sistema deveria evoluir para o estado de menor energia. No entanto, segundo as equações (6.66), para que o estado fundamental seja o estado estacionário do sistema é necessário que o estado inicial não contenha contribuições dos demais estados, apenas do próprio estado fundamental.

Até o momento assumimos $h_x = 0$. Para investigar qual a influência do campo externo na direção x (mantendo $h_z \neq 0$) na dinâmica do sistema em $T = 0K$, diagonalizamos numericamente o Hamiltoniano \hat{H}_{xxz} e, conseqüentemente, a matriz Λ (6.58). O cálculo numérico mostrou que a aplicação do campo h_x inibe a possibilidade de um estado estacionário além do estado fundamental. Mesmo para h_x muito pequeno, a matriz Λ apresenta um autovalor nulo não-degenerado. Para mostrar isso de maneira analítica vamos tratar o campo h_x

como uma perturbação, o que nos possibilita calcular os coeficientes C_{ij} através da Teoria de Perturbação [155]. O Hamiltoniano do modelo XXZ para $N = 2$ pode ser reescrito como $\hat{H}_{xxz} = \hat{H}_{xxz}^0 + \zeta \hat{V}$, com:

$$\hat{H}_{xxz}^0 = \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x + \hat{\sigma}_1^y \hat{\sigma}_2^y + \Delta \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_2^z - \frac{h_z}{2} (\hat{\sigma}_1^z + \hat{\sigma}_2^z), \quad (6.67)$$

$$\hat{V} = \hat{\sigma}_1^x + \hat{\sigma}_2^x, \quad (6.68)$$

onde $\zeta = -h_x/2$ e o parâmetro de perturbação. A correção das autoenergias (6.61) em primeira ordem de perturbação são determinadas pela expressão $\epsilon_n^{(1)} = \langle n | \hat{V} | n \rangle$, onde $|n\rangle$ é o autoestado não-perturbado relativo a autoenergia ϵ_n . Entretanto, para os autoestados (6.62) tem-se $\epsilon_n^{(1)} = 0$ - não há correções em primeira ordem de perturbação. A correção em segunda ordem da autoenergia ϵ_n é dada por:

$$\epsilon_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | \hat{V} | n \rangle|^2}{\epsilon_n - \epsilon_m}. \quad (6.69)$$

As autoenergias corrigidas até segunda ordem são:

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}_1 &= \epsilon_1, \\ \tilde{\epsilon}_2 &= \epsilon_2 - \frac{h_x^2}{2} \left(\frac{1}{\omega_{23}} + \frac{1}{\omega_{24}} \right), \\ \tilde{\epsilon}_3 &= \epsilon_3 + \frac{h_x^2}{2} \frac{1}{\omega_{23}}, \\ \tilde{\epsilon}_4 &= \epsilon_4 + \frac{h_x^2}{2} \frac{1}{\omega_{24}}, \end{aligned}$$

mostrando que a energia do estado fundamental permanece inalterada até segunda ordem. O autoestado $|n\rangle$ corrigido até primeira ordem é obtido através da expressão:

$$|\tilde{n}\rangle = |n\rangle + \zeta \sum_{m \neq n} \frac{\langle m | \hat{V} | n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} |m\rangle. \quad (6.70)$$

Logo, os autoestados (6.62) corrigidos até primeira ordem são:

$$\begin{aligned} |\tilde{1}\rangle &= |1\rangle, \\ |\tilde{2}\rangle &= |2\rangle + \frac{h_x}{\sqrt{2}\omega_{23}} |3\rangle + \frac{h_x}{\sqrt{2}\omega_{24}} |4\rangle, \\ |\tilde{3}\rangle &= |2\rangle - h_x \frac{\sqrt{2}}{2\omega_{23}} |2\rangle, \\ |\tilde{4}\rangle &= |4\rangle - h_x \frac{\sqrt{2}}{2\omega_{24}} |2\rangle. \end{aligned}$$

Para que a dinâmica do sistema admita um único estado estacionário é necessário que exista apenas um autovalor nulo associado a matriz Λ (6.58). No caso $h_z \neq 0$ e $h_x = 0$ existem dois autovalores iguais a zero pois o coeficiente $C_{12} = 0$ – segundo (6.59) o autovalor λ_2 é proporcional a C_{12} . A questão a ser investigada agora é se o campo na direção x afeta o coeficiente C_{12} . Como a introdução do campo h_x gera um novo conjunto de autoestados, a equação mestra deve ser modificada, tendo em vista que o cálculo dos $A_{ij}(\omega)$ envolve os autoestados do Hamiltoniano do sistema. Entretanto, como a ação (perturbativa) do campo h_x mantém a estrutura de *gaps* não-degenerados, a nova matriz Λ é obtida simplesmente usando os novos autoestados no cálculo dos coeficientes C_{ij} . Por exemplo, o coeficiente C_{12} é determinado da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} C_{12} &= |\langle \tilde{1} | \sigma_1^x | \tilde{2} \rangle|^2 + |\langle \tilde{1} | \sigma_2^x | \tilde{2} \rangle|^2 \\ &= |\langle 1 | \sigma_1^x | \tilde{2} \rangle|^2 + |\langle 1 | \sigma_2^x | \tilde{2} \rangle|^2, \end{aligned}$$

mas

$$\begin{aligned} \langle 1 | \sigma_1^x | \tilde{2} \rangle &= \langle 1 | \sigma_1^x \left[|2\rangle + \frac{h_x}{\sqrt{2}\omega_{23}} |3\rangle + \frac{h_x}{\sqrt{2}\omega_{24}} |4\rangle \right] \\ &= \langle 1 | \left[\frac{h_x}{\sqrt{2}\omega_{23}} |\downarrow\uparrow\rangle + \frac{h_x}{\sqrt{2}\omega_{24}} |\uparrow\downarrow\rangle \right] \\ &= \frac{h_x}{2} \left(\frac{1}{\omega_{23}} - \frac{1}{\omega_{24}} \right). \end{aligned}$$

Procedendo de maneira análoga:

$$\langle 1 | \sigma_2^x | \tilde{2} \rangle = -\frac{h_x}{2} \left(\frac{1}{\omega_{23}} - \frac{1}{\omega_{24}} \right),$$

logo,

$$C_{12} = \frac{h_x^2}{2} \left(\frac{1}{\omega_{23}} - \frac{1}{\omega_{24}} \right)^2.$$

Portanto, como $\omega_{23} \neq \omega_{24}$ o coeficiente $C_{12} = 0$ apenas no caso em que $h_x = 0$. Os demais coeficientes C_{ij} também serão distintos de zero. Este resultado mostra que por menor que seja o valor de $h_x \neq 0$ o sistema sempre evoluirá para o estado fundamental, independente da condição inicial. Segundo a forma da matriz (6.58) e como $\Lambda_{ii} \neq 0$ para $i = 2, 3, 4$, a dinâmica dos elementos $\rho_{ii}(t)$ terá a forma:

$$\rho_{ii}(t) = f(t)e^{-\Lambda_{ii}t} \quad i = 2, 3, 4,$$

onde $f(t)$ é uma função *bem comportada*. Para $\rho_{ii}(t) \approx 0$ é preciso que $t \gg 1/\Lambda_{ii}$. Como $\Lambda_{22} \sim C_{12}$, o tempo t para o sistema atingir o equilíbrio deve satisfazer a condição:

$$t \gg \frac{2}{h_x^2} \left(\frac{1}{\omega_{23}} - \frac{1}{\omega_{24}} \right)^{-2}.$$

isto é, a adição do campo h_x assegura a evolução para o equilíbrio, mas conforme h_x tende a zero o tempo para atingir o estado de equilíbrio torna-se muito grande (divergindo em $h_x = 0$).

No estudo do modelo de Ising desenvolvido na seção 6.1.1.2, para $h_z < 2\Delta$, observamos que embora o sistema pudesse não atingir o equilíbrio em $T = 0K$, o estado assintótico do sistema para $T > 0$ sempre seria descrito pelo *ensemble* de Gibbs. No entanto, o tempo para atingir este estado estacionário (tempo de termalização) cresce exponencialmente conforme a temperatura tendia a zero. Analisando numericamente os autovalores da matriz Λ para o modelo XXZ com $h_z \neq 0$ e $h_x = 0$ no regime de temperatura finita, $T > 0$, nota-se que o sistema sempre atinge o equilíbrio, mesmo para $\Delta > 1 + \frac{h_z}{2}$. Entretanto, para $\Delta > 1 + \frac{h_z}{2}$, o tempo de termalização cresce exponencialmente a medida que $T \rightarrow 0$. Este comportamento é ilustrado na Figura (6.2)c, que descreve $\ln(\tau)$ em função de KT para $\Delta = 2.0, 2.5, 3.0$ e $\Delta = 3.5$. Note também que o valor de Δ também influencia no tempo de termalização, τ cresce a medida que Δ aumenta. Os cálculos numéricos da Figura (6.2) foram realizados para $h_z = 1$ e dissipação ôhmica $f(\omega_{ij}) = \eta\omega_{ij}$ onde η é um parâmetro adimensional (usamos $\eta = 1.0$). Por outro lado, para valores de Δ nos intervalos $1 - \frac{h_z}{2} < \Delta < 1 + \frac{h_z}{2}$ e $\frac{h_z}{2} - 1 < \Delta < 1 - \frac{h_z}{2}$ o tempo de termalização converge (quando $T \rightarrow 0$) para um valor finito, dependente de Δ , como mostrado na Fig. (6.2)a e Fig. (6.2)b. Este comportamento pode ser justificado da seguinte maneira: para $1 - \frac{h_z}{2} < \Delta < 1 + \frac{h_z}{2}$ os autovalores da matriz Λ em $T = 0K$ são dados por:

$$\begin{aligned} \Lambda_{11} &= 0, \\ \Lambda_{22} &= -2f(\omega_{12}), \\ \Lambda_{33} &= -2f(\omega_{23}), \\ \Lambda_{44} &= -2f(\omega_{34}), \end{aligned}$$

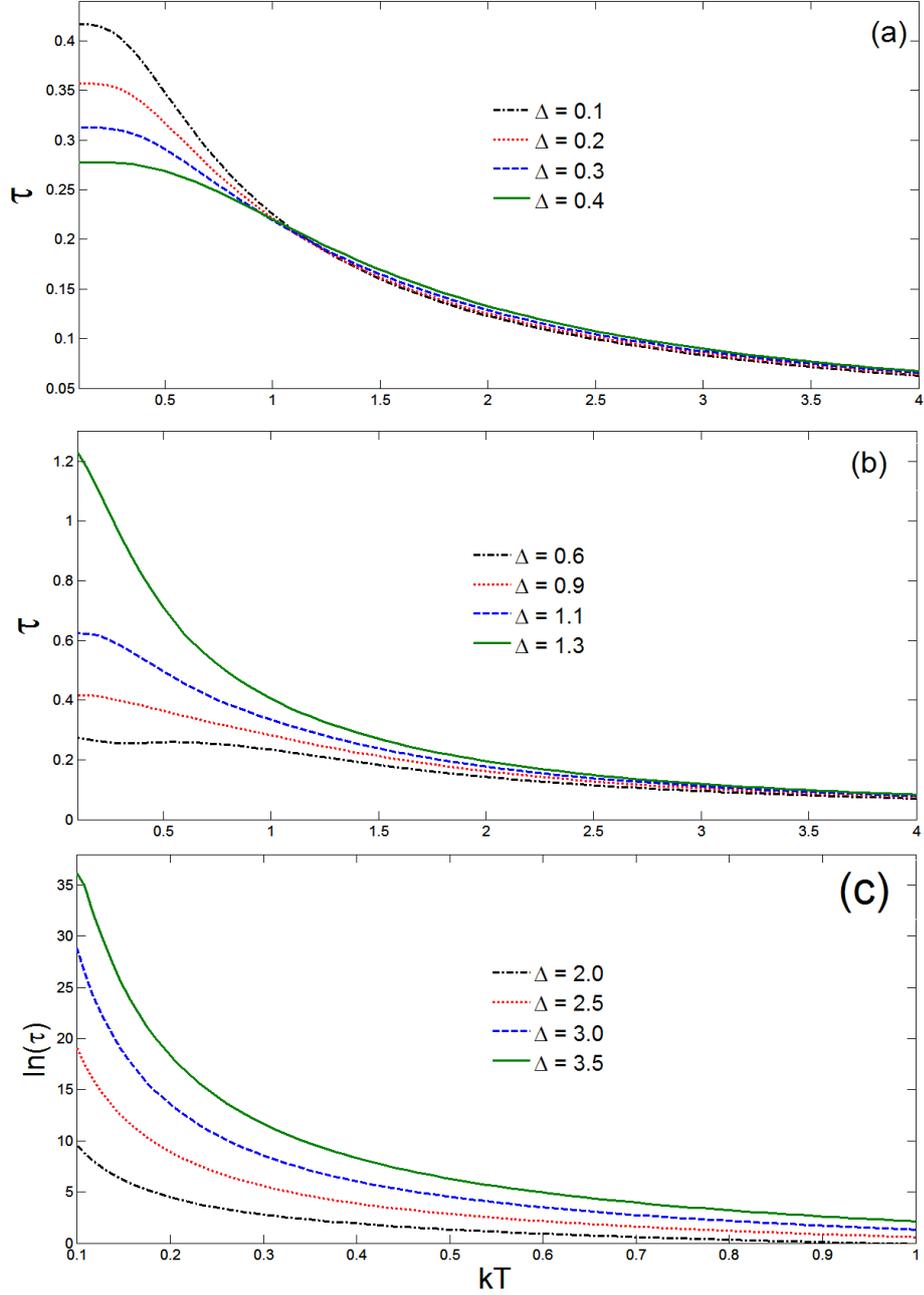


FIGURA 6.2: Tempo de termalização τ em função da temperatura kT para $h_z = 1.0$ e para valores de Δ nos intervalos (a) $\frac{h_z}{2} - 1 < \Delta < 1 - \frac{h_z}{2}$, (b) $1 - \frac{h_z}{2} < \Delta < 1 + \frac{h_z}{2}$ e (c) $\Delta > 1 + \frac{h_z}{2}$. Assumiu-se $h_x = 0$ e dissipação ôhmica $f(\omega_{ij}) = \eta\omega_{ij} = \omega_{ij}$ com $\eta = 1.0$.

determinados através dos valores de C_{ij} da Tabela (6.2). Como as frequências ω_{ij} podem depender do parâmetro Δ , se a densidade espectral depende dessas frequências, então o tempo de termalização também poderá depender de Δ . Isso é evidente ao observarmos a forma dos autovalores Λ_{ii} . Por exemplo, como assumimos $f(\omega_{ij}) = \omega_{ij}$, para $\Delta = 1.3$ tem-se que $\tau = 1/|\lambda_m| \rightarrow 1.25$ quando $T \rightarrow 0$. Este resultado possui uma boa concordância com o resultado da Fig. (6.2)b para $\Delta = 1.3$. O mesmo acontece para os outros valores de Δ no intervalo $\frac{h_z}{2} - 1 < \Delta < 1 - \frac{h_z}{2}$.

Este resultado mostra que se o sistema não possui um único estado estacionário em $T = 0K$, o sistema levará um tempo muito longo para atingir o equilíbrio térmico no regime de baixas temperaturas. Logo, o comportamento dinâmico em $T = 0K$ fornece informações sobre a dinâmica em $T > 0$.

6.1.3.2 Reservatório Comum: $N_R = 1$

A equação mestra deduzida na seção 6.1.2 é válida tanto para reservatórios independentes quanto na descrição de um único reservatório, comum a todos os spins. A diferença entre estas duas abordagens aparece apenas no cálculo dos coeficientes C_{ij} , pois assumimos que todos os reservatórios possuem a mesma densidade espectral $f(\omega)$ e a mesma temperatura T . No caso de reservatório independentes os coeficientes C_{ij} são dados pela seguinte expressão:

$$C_{ij} = |A_{ij}^1|^2 + |A_{ij}^2|^2,$$

onde $A_{ij}^k = \langle i | \hat{\sigma}_x^k | j \rangle$. Neste caso a interação com cada um dos reservatórios térmicos é mediada pelos operadores $\hat{A}_1 = \hat{\sigma}_1^x$ e $\hat{A}_2 = \hat{\sigma}_2^x$. Como discutido na seção sobre o modelo de Ising, a interação com o reservatório comum é determinada pelo operador $\hat{A} = \hat{A}_1 + \hat{A}_2$. Com isso, os coeficientes C_{ij} assumem a forma:

$$C_{ij} = |A_{ij}^1 + A_{ij}^2|^2 = |\langle i | \hat{\sigma}_1^x + \hat{\sigma}_2^x | j \rangle|^2. \quad (6.71)$$

A tabela (6.3) exhibe os valores de C_{ij} para distintos intervalos de variação de Δ . Como $C_{12} = 0$ independente do intervalo de variação de Δ , a matriz Λ terá pelo menos dois autovalores nulos em $T = 0K$. Portanto, quando os dois

spins interagem com um mesmo reservatório térmico a temperatura nula, o estado estacionário do sistema não será determinado necessariamente pelo *ensemble* de Gibbs.

	$\Delta < -1 - \frac{\hbar\omega_z}{2}$	$-1 - \frac{\hbar\omega_z}{2} < \Delta < \frac{\hbar\omega_z}{2} - 1$	$\frac{\hbar\omega_z}{2} - 1 < \Delta < 1 - \frac{\hbar\omega_z}{2}$	$1 - \frac{\hbar\omega_z}{2} < \Delta < 1 + \frac{\hbar\omega_z}{2}$	$\Delta > 1 + \frac{\hbar\omega_z}{2}$
C_{12}	0	0	0	0	0
C_{13}	0	0	0	0	0
C_{14}	2	2	0	0	0
C_{23}	0	0	0	2	2
C_{24}	2	0	2	0	2
C_{34}	0	2	2	2	0

TABELA 6.3: Coeficientes C_{ij} em função do intervalo de variação de Δ . Estes resultados **não** são válidos para $\Delta \in \{-1, 0, 1, -\frac{3\hbar}{2} - 1, -\frac{\hbar}{2} - 3\}$ e $\Delta \in \{\frac{3\hbar}{2} + 1, \frac{\hbar}{2} + 3\}$.

Para exemplificar o comportamento dinâmico do sistema vamos considerar $\frac{\hbar\omega_z}{2} - 1 < \Delta < 1 - \frac{\hbar\omega_z}{2}$. Para Δ variando neste intervalo a dinâmica das populações do operador densidade por ser obtida facilmente, basta resolver o seguinte sistema de equações:

$$\begin{pmatrix} \dot{\rho}_{1,1} \\ \dot{\rho}_{2,2} \\ \dot{\rho}_{3,3} \\ \dot{\rho}_{4,4} \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2f(\omega_{24}) \\ 0 & 0 & 0 & 2f(\omega_{34}) \\ 0 & 0 & 0 & -2(f(\omega_{24}) + f(\omega_{34})) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{1,1} \\ \rho_{2,2} \\ \rho_{3,3} \\ \rho_{4,4} \end{pmatrix},$$

cuja solução é dada por:

$$\begin{aligned} \rho_{1,1}(t) &= \rho_{1,1}(0), \\ \rho_{2,2}(t) &= \rho_{2,2}(0) + \frac{f(\omega_{24})}{f(\omega_{24}) + f(\omega_{34})} (1 - e^{-4(f(\omega_{24})+f(\omega_{34}))t}) \rho_{4,4}(0), \\ \rho_{3,3}(t) &= \rho_{3,3}(0) + \frac{f(\omega_{34})}{f(\omega_{24}) + f(\omega_{34})} (1 - e^{-4(f(\omega_{24})+f(\omega_{34}))t}) \rho_{4,4}(0), \\ \rho_{4,4}(t) &= e^{-4(f(\omega_{24})+f(\omega_{34}))t} \rho_{4,4}(0). \end{aligned}$$

No regime estacionário as populações assumem a forma:

$$\begin{aligned}\rho_{1,1}(t \rightarrow \infty) &= \rho_{1,1}(0), \\ \rho_{2,2}(t \rightarrow \infty) &= \rho_{2,2}(0) + \frac{f(\omega_{24})}{f(\omega_{24}) + f(\omega_{34})} \rho_{4,4}(0), \\ \rho_{3,3}(t \rightarrow \infty) &= \rho_{3,3}(0) + \frac{f(\omega_{34})}{f(\omega_{24}) + f(\omega_{34})} \rho_{4,4}(0), \\ \rho_{4,4}(t \rightarrow \infty) &= 0.\end{aligned}$$

Como já observado no modelo de Ising, a interação com um único reservatório térmico a $T = 0K$ não assegura a evolução do sistema para o estado fundamental, pois os estados excitados $|2\rangle$ e $|3\rangle$ também podem ser populados no limite assintótico. Note também que embora a população do estado fundamental se mantenha inalterada durante a evolução, dependendo apenas de $\rho_{1,1}(0)$, as populações dos estados $|2\rangle$ e $|3\rangle$ dependem dos seus valores iniciais e da população inicial do estado $|4\rangle$. Ainda, se $\rho_{4,4}(0) = 0$ as populações não serão afetadas pela dinâmica do sistema, pois $\rho_{i,i}(t) = \rho_{i,i}(0)$ para todo t e $i = 1, \dots, 4$. Analisando as equações (6.49) e (6.52) com base na Tabela (6.3) pode-se ver que apenas as coerências $\rho_{1,4}$, $\rho_{2,4}$, e $\rho_{3,4}$ tendem a zero no limite assintótico, enquanto que as demais coerências apresentam um comportamento oscilatório:

$$\begin{aligned}\rho_{1,2}(t) &= e^{i\omega_{12}t} \rho_{1,2}(0), \\ \rho_{1,3}(t) &= e^{i\omega_{12}t} \rho_{1,3}(0), \\ \rho_{2,3}(t) &= e^{i\omega_{12}t} \rho_{2,3}(0),\end{aligned}$$

logo o regime estacionário existe apenas quando $\rho_{1,2}(0) = \rho_{1,3}(0) = \rho_{2,3}(0) = 0$. Se pelo menos uma destas coerências for diferente de zero o estado do sistema não será independente do tempo, mesmo para tempos longos.

Expressões analíticas dos autovalores da matriz Λ para T arbitrário não são obtidas facilmente. Entretanto, para temperaturas elevadas, $kT \gg \omega_{ij}$, pode-se fazer uso novamente da aproximação (6.44):

$$\gamma(\omega_{ij}) \approx \gamma(-\omega_{ij}) \approx f(\omega_{ij}) \frac{kT}{\omega_{ij}} \Rightarrow B_{ij} \approx \tilde{B}_{ij},$$

onde $f(\omega_{ij})$ é a densidade espectral. Neste caso a matriz Λ torna-se simétrica e os autovalores λ_j , com $j = 1, \dots, 4$, podem ser obtidos analiticamente. A Tabela

	$\Delta < -1 - \frac{h_z}{2}$	$-1 - \frac{h_z}{2} < \Delta < \frac{h_z}{2} - 1$	$\frac{h_z}{2} - 1 < \Delta < 1 - \frac{h_z}{2}$	$1 - \frac{h_z}{2} < \Delta < 1 + \frac{h_z}{2}$	$\Delta > 1 + \frac{h_z}{2}$
λ_1	0	0	0	0	0
λ_2	0	0	0	0	0
λ_3	$4\Gamma_{1424}^+$	$4\Gamma_{1434}^+$	$4\Gamma_{2434}^+$	$4\Gamma_{2334}^+$	$4\Gamma_{2324}^+$
λ_4	$4\Gamma_{1424}^-$	$4\Gamma_{1434}^-$	$4\Gamma_{2434}^-$	$4\Gamma_{2334}^-$	$4\Gamma_{2324}^+$

TABELA 6.4: Autovalores da matriz Λ , denotados por λ_j , em função do intervalo de variação de Δ para $T \gg \omega_{ij}$ com $\Gamma_{ijkl}^\pm = -\gamma_{ij}^- - \gamma_{kl}^- \pm \sqrt{(\gamma_{ij}^-)^2 + (\gamma_{kl}^-)^2 - \gamma_{ij}^- \gamma_{kl}^-}$ e $\gamma_{ij}^- = \gamma(-\omega_{ij})$. Estes resultados **não** são válidos para $\Delta \in \{-1, 0, 1, -\frac{3h}{2} - 1, -\frac{h}{2} - 3\}$ e $\Delta \in \{\frac{3h}{2} + 1, \frac{h}{2} + 3\}$.

(6.4) mostra os autovalores λ_j em função de Δ . Com base nestes resultados concluímos que mesmo se a temperatura do reservatório for muito alta não há garantias que o estado de equilíbrio previsto pela Mecânica Estatística será atingido. Há pelo menos dois autovalores nulos para praticamente todos os valores de Δ possíveis²⁴. Os outros dois autovalores são determinados através da equação:

$$\begin{aligned} \Gamma_{ijkl}^\pm &= -\gamma_{ij}^- - \gamma_{kl}^- \pm \sqrt{(\gamma_{ij}^-)^2 + (\gamma_{kl}^-)^2 - \gamma_{ij}^- \gamma_{kl}^-} \\ &= -kT \left[\frac{f_{ij}}{\omega_{ij}} + \frac{f_{kl}}{\omega_{kl}} \mp \sqrt{\frac{f_{ij}^2}{\omega_{ij}^2} + \frac{f_{kl}^2}{\omega_{kl}^2} - \frac{f_{ij} f_{kl}}{\omega_{ij} \omega_{kl}}} \right], \end{aligned} \quad (6.72)$$

onde $f_{ij} = f(\omega_{ij})$ e $i < j$. Para provar que $\Gamma_{ijkl}^\pm \leq 0$ note primeiramente que $a = \frac{f_{ij}}{\omega_{ij}} \geq 0$ e $b = \frac{f_{kl}}{\omega_{kl}} \geq 0$. A termo dentro da raiz quadrada é não negativo pois $(a - b)^2 \geq 0 \Rightarrow a^2 + b^2 - ab \geq 0$. Logo para existir um autovalor positivo é necessário que:

$$\begin{aligned} a + b - \sqrt{a^2 + b^2 - ab} < 0 &\Rightarrow a^2 + b^2 + 2ab < a^2 + b^2 - ab \\ &\Rightarrow 2ab < -ab, \end{aligned}$$

mas essa desigualdade não pode ser satisfeita pois $a \geq 0$ e $b \geq 0$. Portanto os autovalores λ_j da matriz Λ são número reais não-negativos. A dinâmica das populações do operador densidade para $kT \gg \omega_{ij}$ é obtida através do seguinte conjunto de equações diferenciais:

$$\begin{pmatrix} \dot{\rho}_{1,1} \\ \dot{\rho}_{2,2} \\ \dot{\rho}_{3,3} \\ \dot{\rho}_{4,4} \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} \Lambda_{11} & 0 & 0 & \tilde{B}_{14} \\ 0 & \Lambda_{22} & \tilde{B}_{23} & \tilde{B}_{24} \\ 0 & \tilde{B}_{23} & \Lambda_{33} & \tilde{B}_{34} \\ \tilde{B}_{14} & \tilde{B}_{24} & \tilde{B}_{34} & \Lambda_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{1,1} \\ \rho_{2,2} \\ \rho_{3,3} \\ \rho_{4,4} \end{pmatrix} \quad (6.73)$$

²⁴Lembre que estamos excluindo valores de Δ nos extremos dos intervalos e os valores pertencentes ao conjunto $\Delta \in \{-1, 0, 1, -\frac{3h}{2} - 1, -\frac{h}{2} - 3, \frac{3h}{2} + 1, \frac{h}{2} + 3\}$. Estamos excluindo apenas 11 valores de Δ entre os infinitos valores possíveis.

pois $C_{12} = C_{13} = 0$ para todos os intervalos de variação de Δ . Para $\Delta > h_z/2 - 1$ tem-se também $C_{14} = 0$, logo $\tilde{B}_{14} = 0$ e $\Lambda_{11} = 0$. Neste caso a equação para a população do estado fundamental $\rho_{1,1}$ é desacoplada das demais e sua solução é trivial:

$$\rho_{1,1}(t) = \rho_{1,1}(0), \quad (6.74)$$

mostrando que a população do estado fundamental não é alterada pela dinâmica do sistema. Portanto, a dinâmica das populações restantes é obtida resolvendo o sistema:

$$\begin{pmatrix} \dot{\rho}_{2,2} \\ \dot{\rho}_{3,3} \\ \dot{\rho}_{4,4} \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} \Lambda_{22} & \tilde{B}_{23} & \tilde{B}_{24} \\ \tilde{B}_{23} & \Lambda_{33} & \tilde{B}_{34} \\ \tilde{B}_{24} & \tilde{B}_{34} & \Lambda_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{2,2} \\ \rho_{3,3} \\ \rho_{4,4} \end{pmatrix}. \quad (6.75)$$

Usando a notação $x_i = \rho_{i+1,i+1}$ com $i = 1, 2, 3$, o sistema acima pode ser reescrito na forma vetorial $\frac{d}{dt}\vec{x} = \mathbf{M}\vec{x}$, cuja solução envolve a diagonalização da matriz \mathbf{M} . Seja \mathbf{U} a matriz que diagonaliza \mathbf{M} , ou seja, $\mathbf{U}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{U} = \mathbf{D}$, onde \mathbf{D} é a matriz diagonal $\mathbf{D} = \text{diag}(\eta_1, \eta_2, \eta_3)$, formada pelos autovalores η_i de \mathbf{M} . A matriz \mathbf{U} é tal que as suas colunas são os autovetores \vec{v}_i de \mathbf{M} associados aos autovalores η_i . Portanto, assumindo \mathbf{U} independente do tempo e definindo $\vec{y} = \mathbf{U}^{-1}\vec{x}$ temos que:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\vec{x} = \mathbf{M}\vec{x} &\Rightarrow \mathbf{U}^{-1}\frac{d}{dt}\vec{x} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{U}\mathbf{U}^{-1}\vec{x} \\ &\Rightarrow \frac{d}{dt}\vec{y} = \mathbf{D}\vec{y}, \end{aligned}$$

logo a evolução temporal da k -ésima componente do vetor \vec{y} é dada por:

$$y_k(t) = e^{\eta_k t} y_k(0).$$

Como

$$x_j(t) = \sum_{k=1}^3 u_{jk} y_k(t) \quad \text{e} \quad y_k(0) = \sum_{l=1}^3 u_{kl}^{-1} x_l(0),$$

onde u_{kl}^{-1} corresponde ao elemento da linha k e coluna l da matriz inversa \mathbf{U}^{-1} , a solução formal para $x_j(t)$ pode ser escrita como:

$$x_j(t) = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 u_{jk} u_{kl}^{-1} e^{\eta_k t} x_l(0).$$

Reescrevendo essa equação através da correspondência $x_j = \rho_{j+1,j+1}$ e $\eta_j = \lambda_{j+1}$:

$$\rho_{j+1,j+1}(t) = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 u_{jk} u_{kl}^{-1} e^{\lambda_{k+1}t} \rho_{l+1,l+1}(0) \quad j = 1, 2, 3, \quad (6.76)$$

onde o autovalor λ_2 é sempre igual a zero enquanto que os autovalores λ_3 e λ_4 podem ser menores ou iguais a zero. Como $f(\omega_{ij}) > 0$, concluíse por meio da equação (6.72) que $\lambda_3 < 0$ e $\lambda_4 < 0$, logo as populações do operador densidade no estado estacionário serão:

$$\rho_{j+1,j+1}(t \rightarrow \infty) = u_{j1} \sum_{l=1}^3 u_{1l}^{-1} \rho_{l+1,l+1}(0) \quad j = 1, 2, 3, \quad (6.77)$$

lembrando que a matriz \mathbf{U} é construída por meio dos autovetores de \mathbf{M} . Um ponto importante diz respeito ao tempo para atingir o estado estacionário. Como os autovalores negativos são proporcionais a kT , o termo $e^{\lambda_i t}$ tende a zero mais rápido a medida que T aumenta, ou seja, o tempo para atingir o estado estacionário diminui conforme a temperatura cresce. Infelizmente nem sempre é fácil encontrar a matriz \mathbf{U} . Para ilustrar um situação onde é possível determiná-la considere $\frac{h_z}{2} - 1 < \Delta < 1 - \frac{h_z}{2}$. Neste caso a matriz \mathbf{U} possui a forma:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & u_{12} & u_{13} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & u_{22} & u_{23} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{N_2} & \frac{1}{N_3} \end{pmatrix}, \quad (6.78)$$

assim como a sua inversa:

$$\mathbf{U}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ u_{12} & u_{22} & \frac{1}{N_2} \\ u_{13} & u_{23} & \frac{1}{N_3} \end{pmatrix}, \quad (6.79)$$

onde

$$u_{12} = \frac{1}{N_3} \frac{\gamma_{24}^-}{\gamma_{24}^- + \lambda_3/4}, \quad u_{22} = \frac{1}{N_3} \frac{\gamma_{34}^-}{\gamma_{34}^- + \lambda_3/4},$$

$$u_{13} = \frac{1}{N_4} \frac{\gamma_{24}^-}{\gamma_{24}^- + \lambda_4/4}, \quad u_{23} = \frac{1}{N_4} \frac{\gamma_{34}^-}{\gamma_{34}^- + \lambda_4/4},$$

com

$$N_3 = \sqrt{1 + \left(\frac{\gamma_{24}^-}{\gamma_{24}^- + \lambda_3/4} \right)^2 + \left(\frac{\gamma_{34}^-}{\gamma_{34}^- + \lambda_3/4} \right)^2},$$

$$N_4 = \sqrt{1 + \left(\frac{\gamma_{24}^-}{\gamma_{24}^- + \lambda_4/4} \right)^2 + \left(\frac{\gamma_{34}^-}{\gamma_{34}^- + \lambda_4/4} \right)^2}.$$

As populações do operador densidade no regime estacionário são obtidas aplicando estes resultados na equação (6.77):

$$\begin{aligned}
 \rho_{1,1}(t) &= \rho_{1,1}(0) \quad \text{vale para todo } t, \\
 \rho_{2,2}(t \rightarrow \infty) &= \frac{1}{3} (\rho_{2,2}(0) + \rho_{3,3}(0) + \rho_{4,4}(0)), \\
 \rho_{3,3}(t \rightarrow \infty) &= \frac{1}{3} (\rho_{2,2}(0) + \rho_{3,3}(0) + \rho_{4,4}(0)), \\
 \rho_{4,4}(t \rightarrow \infty) &= \frac{1}{3} (\rho_{2,2}(0) + \rho_{3,3}(0) + \rho_{4,4}(0)).
 \end{aligned} \tag{6.80}$$

Note que as populações independem da forma da densidade espectral e da temperatura T , desde que $T \gg \omega_{ij}$. Segundo estas equações fica evidente que o sistema pode não atingir o estado de equilíbrio, pois para $T \gg \omega_{ij}$ o *ensemble* de Gibbs implica num operador densidade da forma:

$$\rho_{T \rightarrow \infty} = \frac{1}{4} (|1\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2| + |3\rangle \langle 3| + |4\rangle \langle 4|),$$

com todos os autoestados igualmente populados. Mas, conforme as equações (6.80), para que o estado $\rho_{T \rightarrow \infty}$ seja o estado estacionário da equação mestra é necessário que a população do estado fundamental seja igual a $1/4$ e a soma das outras populações seja igual a $3/4$.

6.1.4 Uma Rota para o *Ensemble* de Gibbs

Com base nos modelos estudados neste capítulo constatamos uma importante diferença entre a dinâmica proveniente da interação com reservatórios térmicos independentes e aquela em que todos os spins interagem com o mesmo reservatório térmico. No caso de reservatórios térmicos independentes a ausência de termalização ocorre apenas para $T = 0K$, enquanto que na interação com um único reservatório essa ausência é observada inclusive para temperaturas finitas. Entretanto, mesmo quando a interação com reservatórios independentes assegura a evolução para o estado de equilíbrio para $T > 0$, se a dinâmica em $T = 0K$ não evoluir necessariamente para o estado previsto pelo *ensemble de Gibbs*, o tempo para atingir o estado de equilíbrio tende a infinito conforme $T \rightarrow 0$. Em outras palavras, a ausência de termalização em $T = 0K$ implica num tempo de termalização muito grande no regime de baixas temperaturas.

Uma maneira de estudar sistemas em baixas temperaturas envolve o resfriamento do sistema de uma temperatura T até uma temperatura próxima de $0K$. Neste cenário, espera-se que o estado fundamental ofereça uma boa descrição do sistema, desde que $\rho_T \sim \exp(-\hat{H}/kT) \rightarrow |G\rangle \langle G|$ para $T \rightarrow 0$, onde $|G\rangle$ é o estado fundamental do Hamiltoniano \hat{H} . Segundo os resultados obtidos para os modelos de Ising e XXZ, a interação com reservatórios independentes garante a evolução para o estado $\rho_T \sim \exp(-\hat{H}/kT)$ para todo $T > 0$, portanto a relação $\rho_T \approx |G\rangle \langle G|$ é uma boa aproximação no regime de baixas temperaturas. Entretanto, se o sistema partir de uma temperatura próxima de zero absoluto o tempo de termalização poderá ser superior ao tempo de realização do experimento, inviabilizando a termalização. O objetivo desta seção é comparar o tempo de termalização no regime de baixas temperaturas, $kT \ll \omega_{ij}$, através de dois processos distintos:

Processo 1: Estima-se o tempo de termalização para um sistema em contato com um reservatório térmico a temperatura T_b com $kT_b \ll \omega_{ij}$.

Processo 2: O reservatório encontra-se inicialmente a temperatura T_0 com $kT_0 \gg \omega_{ij}$. Após acoplar um sistema a este reservatório espera-se o sistema entrar em equilíbrio térmico com o reservatório. Em seguida, a temperatura do reservatório sofre uma pequena redução, $T_0 \rightarrow T_0 - \delta T$, e novamente espera-se o equilíbrio térmico ser atingido. Este procedimento é repetido até a temperatura do reservatório atingir o valor T_b (definida no processo 1).

Os dois processos estão esquematizados na Figura (6.3). Para investigar esse ponto vamos considerar o modelo XXZ [eq. (6.67)] com $h_x = 0$ e $h_z = 1$. Os valores de Δ que serão escolhidos são tais que o sistema não termaliza em $T = 0K$, ou seja, $\Delta > 1 + h_z/2 = 1.5$. Novamente, vamos assumir uma dissipação ôhmica, $f(\omega) = \eta\omega$ com $\eta = 1$.

Vamos discutir primeiramente o *processo 1*. Fixando $\Delta = 2.0$ tem-se que $\omega_{min} \equiv \min \{\omega_{ij}\} = 1.0$. Neste caso, vamos adotar $kT_b = 0.1 < \omega_{min}$, assegurando o regime de baixas temperaturas. Portanto, o tempo de termalização estimado numericamente é $\tau \approx 1.3 \times 10^4$. Entretanto, como discutido na seção 6.1.1.2, para algumas condições iniciais o sistema pode atingir o estado estacionário para

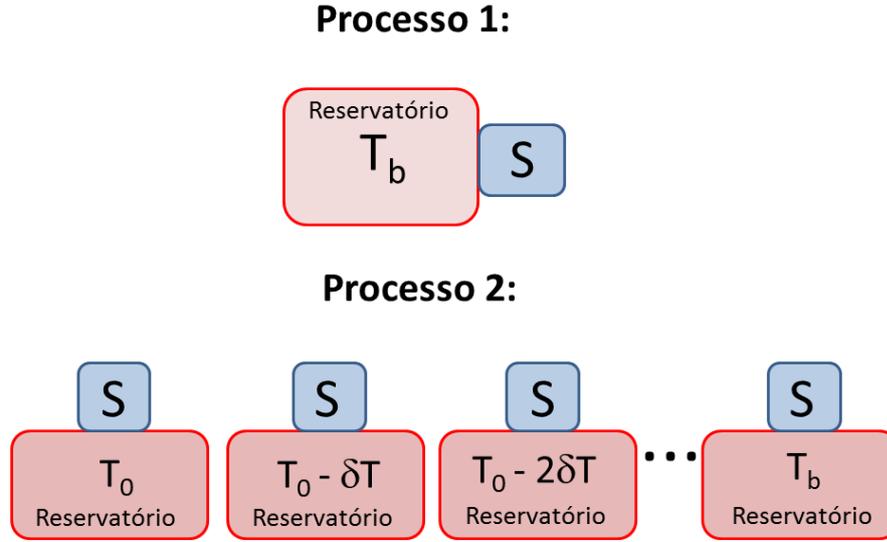


FIGURA 6.3: **Processo 1:** o sistema S está acoplado com um reservatório a temperatura T_b . **Processo 2:** o sistema S encontra-se inicialmente acoplado a um reservatório com temperatura T_0 . Em seguida, a temperatura do reservatório é reduzida até atingir o valor T_b .

$t < \tau$. Para investigar este ponto vamos assumir uma condição inicial da forma:

$$\rho(0) = \frac{e^{-\hat{H}_S/kT_0}}{Z}, \quad (6.81)$$

onde Z é a função de partição. O intuito agora é verificar como o operador densidade obtido através da equação mestra, $\rho(t)$, se aproxima do estado previsto pelo *ensemble* de Gibbs, ρ_T [eq. (6.7)], dado que a temperatura do reservatório é $kT_b = 0.1$, para distintos valores de kT_0 . Para calcular a distância entre ρ_T e $\rho(t)$ vamos utilizar a medida conhecida como *distância traço* [12], definida como $T_d(\rho, \sigma) \equiv \frac{1}{2} \text{Tr}|\rho - \sigma| = \frac{1}{2} \sum_j |\alpha_j|$, onde α_j denotam os autovalores da matriz formada pela diferença entre os operadores densidade, $\rho - \sigma$. Segundo a Figura (6.4), o estado estacionário é atingido mais rapidamente conforme kT_0 se aproxima da temperatura do reservatório $kT_b = 0.1$. Note que para $kT_0 = 0.20$ o operador densidade $\rho(t)$ está muito próximo do estado térmico ρ_T mesmo para $t < \tau$. Este resultado mostra o tempo para atingir o regime estacionário diminui conforme a condição inicial se aproxima do estado térmico ρ_T .

Por outro lado, com discutido anteriormente, conforme a temperatura do reservatório aumenta o tempo de termalização diminui. Por exemplo, se a temperatura do reservatório for $kT_b = 5.0$ é necessário esperar um tempo $t \gg$

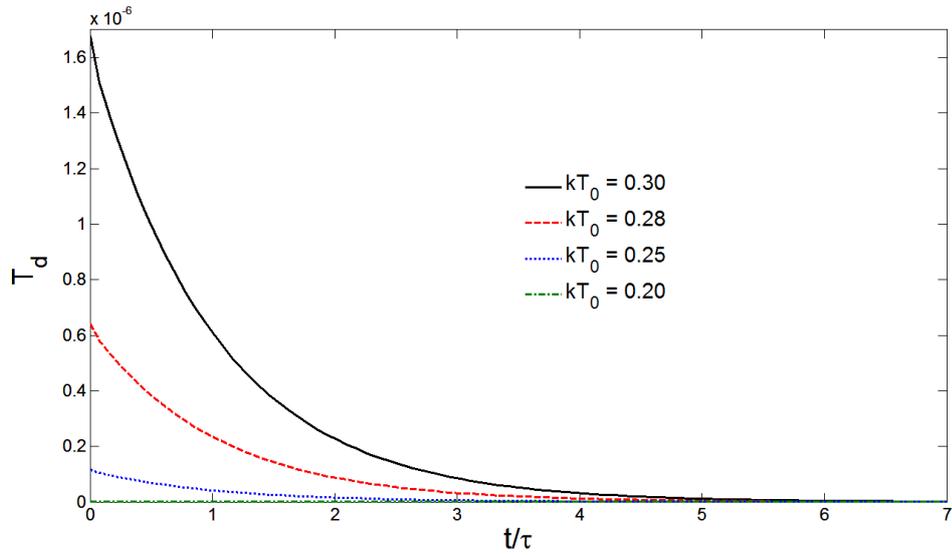


FIGURA 6.4: Distância entre os operadores densidade $\rho(t)$, com $\tau = 1.3 \times 10^4$, e ρ_T em função do tempo t/τ para $kT_0 = 0.30$ (linha preta/sólida), $kT_0 = 0.28$ (linha vermelha/tracejada), $kT_0 = 0.25$ (linha azul/pontilhada) e $kT_0 = 0.20$ (linha verde/ponto-tracejada).

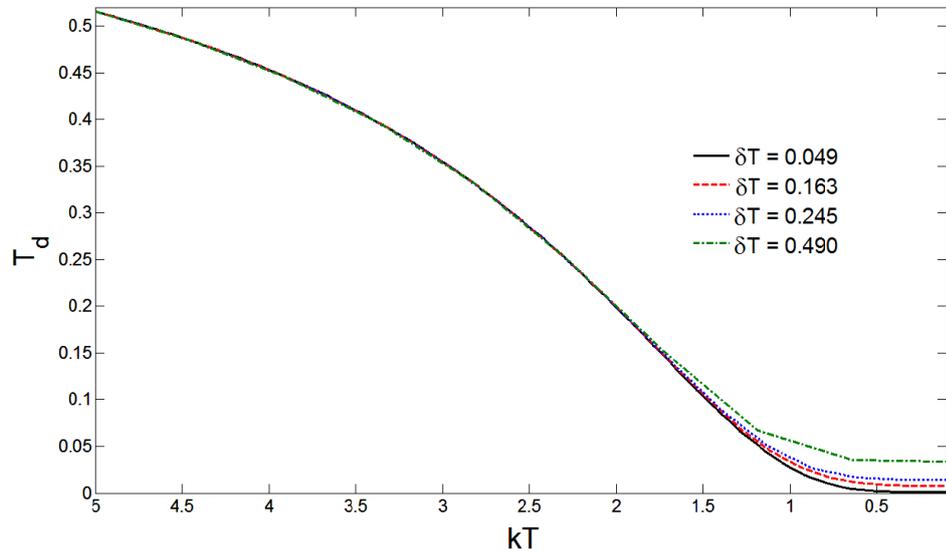


FIGURA 6.5: Distância traço T_d entre os operadores densidade $\rho(\tilde{t})$ e ρ_{T_b} em função da temperatura do reservatório kT , com $t = \tilde{t} = 1.3 \times 10^{-4} \tau$, para $\delta T = 0.0049$ (linha preta/sólida), $\delta T = 0.163$ (linha vermelha/tracejada), $\delta T = 0.245$ (linha azul/pontilhada) e $\delta T = 0.490$ (linha verde/ponto-tracejada). Conforme δT diminui o estado do sistema $\rho(\tilde{t})$ torna-se mais próximo do estado térmico ρ_{T_b} com $kT_b = 0.1$.

0.07 para atingir o regime estacionário, independente da condição inicial. Vamos fixar o tempo de evolução do operador densidade do sistema $\rho(t)$ como sendo $t = \tilde{t} = 1.3 \times 10^{-4} \tau \gg 0.07$. Embora este valor de t seja suficiente para garantir a termalização do sistema para $kT_b = 5.0$, não se pode assegurar a termalização para temperaturas inferiores a $kT_b = 5.0$. Por outro lado, segundo o resultado anterior, dado o estado inicial (6.81) é possível encontrar um valor de kT_0 tal que o tempo \tilde{t} seja suficiente para garantir a evolução para o estado térmico ρ_T associado a uma temperatura finita arbitrária.

A partir deste momento vamos investigar o *processo 2*. Para tanto, considere o seguinte procedimento: inicialmente o reservatório térmico encontre-se a temperatura $kT = kT_0 = 5.0$. Independente da condição inicial, o estado do sistema em \tilde{t} será aproximadamente o estado térmico ρ_{T_0} . O próximo passo é resfriar o reservatório, ou seja, $kT = kT_0 \rightarrow kT = kT_0 - \delta T$, onde δT mede a variação de temperatura. Como a temperatura do reservatório foi alterada, o sistema irá evoluir até atingir um novo estado estacionário, tendo como ponto de partida o estado inicial ρ_T com $kT = kT_0 = 5.0$. Portanto, ajustando o valor de δT , podemos assegurar que este novo estado estacionário também será atingido após um tempo \tilde{t} . Este procedimento é repetido até que a temperatura do reservatório alcance o valor T_b (definida no processo 1). Isso é feito considerando $\delta T = \frac{|kT_0 - kT_b|}{n_p}$, onde n_p é número de passos necessários para garantir que o regime estacionário seja alcançado no tempo \tilde{t} em cada etapa do processo.

A Figura (6.5) mostra o gráfico da distância traço entre os estados $\rho(\tilde{t})$ e ρ_{T_b} em função da temperatura do reservatório kT para distintos δT . Neste caso ρ_{T_b} denota o estado térmico associado a temperatura final $kT_b = 0.1$. Este gráfico mostra que para uma escolha adequada de δT é possível preparar o sistema no estado ρ_{T_b} resfriando o reservatório a partir de uma dada temperatura $kT > kT_b$ para qualquer condição inicial. É importante observar que em cada etapa precisamos esperar um tempo \tilde{t} e portanto, se forem realizadas n_p etapas, o tempo total será $n_p \tilde{t}$. Neste exemplo, o menor δT equivale a $n_p = 1000$, logo o tempo necessário para realizar este processo será $t_a = 1000 \tilde{t} = 0.13 \tau < \tau$. Portanto, embora seja necessário esperar um tempo $t \gg \tau$ para observar a termalização quando a temperatura inicial do reservatório é muito baixa, através do processo

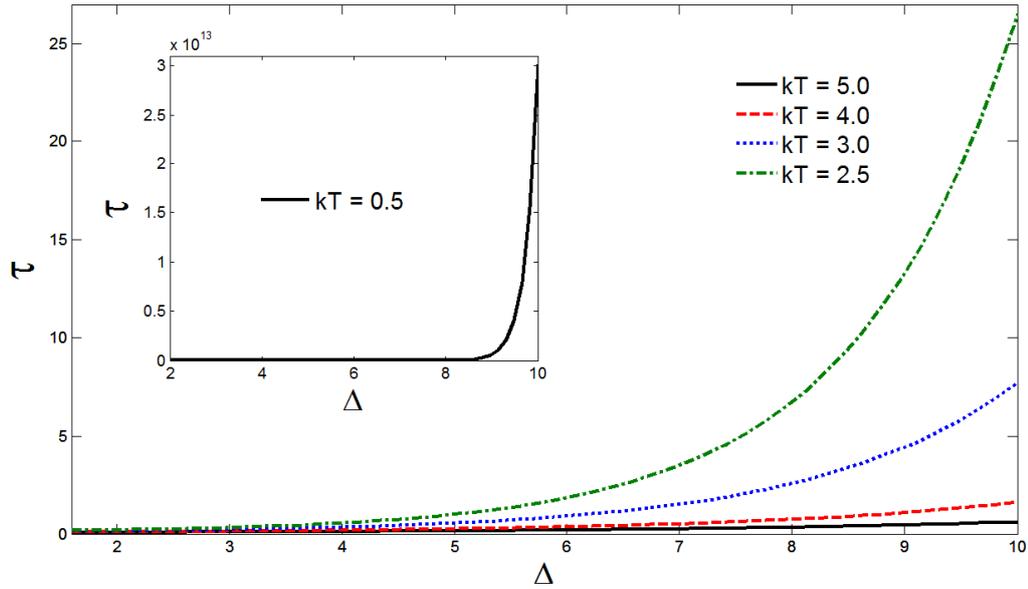


FIGURA 6.6: Tempo de termalização τ em função do parâmetro Δ para diferentes temperaturas: $kT = 5.0$ (linha preta/sólida), $kT = 4.0$ (linha vermelha/tracejada), $kT = 3.0$ (linha azul/pontilhada) e $kT = 2.5$ (linha verde/ponto-tracejada). *Inset*: Tempo de termalização τ em função do parâmetro Δ para $kT = 0.5$. Para $\Delta = 10$ tem-se $\tau \approx 3.0 \times 10^{13}$.

de resfriamento basta esperar um tempo $t_a < \tau \ll t$ para que o estado do sistema seja descrito (com boa aproximação) pelo *ensemble* de Gibbs.

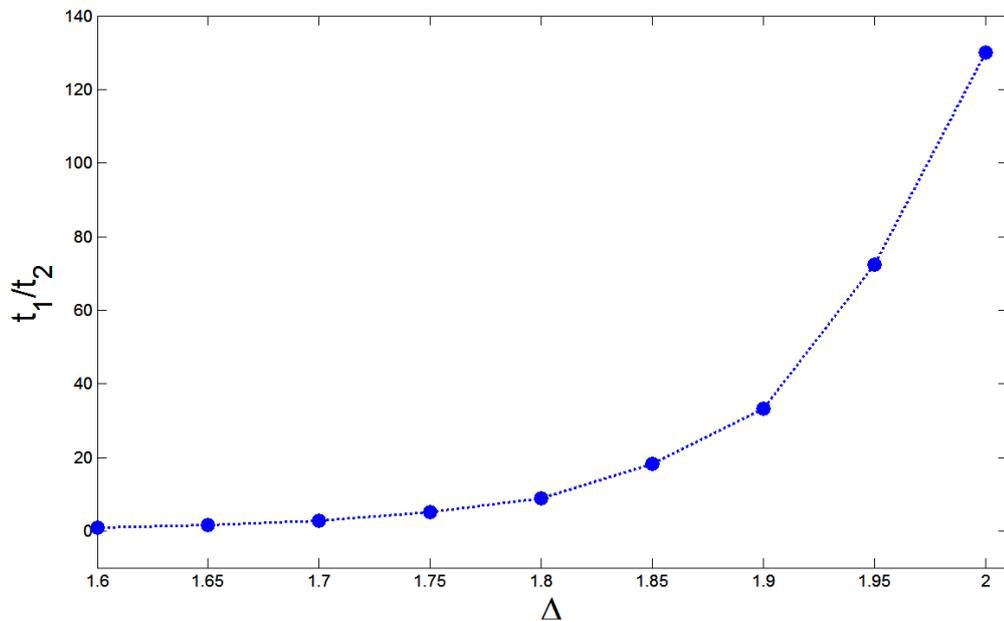


FIGURA 6.7: Razão t_1/t_2 em função do parâmetro Δ . Este gráfico mostra que a diferença $t_1 - t_2 > 0$ aumenta a medida que Δ torna-se maior.

Até agora utilizamos um valor fixo de $\Delta (= 2.0)$. Conforme o valor do parâmetro Δ aumenta o tempo de termalização τ também aumenta, como observado na Figura (6.6). Ainda, para um valor fixo de Δ , o valor de τ também aumenta conforme a temperatura do reservatório diminui. Por exemplo, para $\Delta = 10$ e $kT = 0.5$ tem-se $\tau \approx 3.0 \times 10^{13}$, logo o sistema necessita um tempo $t \gg 3.0 \times 10^{13}$ para atingir o regime estacionário. Agora, vamos verificar a influência do parâmetro Δ nos dois processos de termalização: (1) analisando a evolução temporal do estado inicial $|\uparrow\uparrow\rangle$ quando a temperatura do reservatório é $kT_b = 0.1$ e (2) partindo do mesmo estado inicial mas utilizando o processo de resfriamento, quando a temperatura do reservatório é reduzida lentamente do valor inicial $kT = 4.0$ até o valor final $kT = kT_b$. Os tempos associados aos processos (1) e (2) são denotados por t_1 e t_2 , respectivamente. Para comparar estes dois processos vamos estimar os valores de t_1 e t_2 tal que a diferença entre o operador densidade obtido através de cada processo e o estado térmico (6.7) com kT_b seja da ordem de 10^{-6} . Novamente utilizamos a medida T_d para calcular a diferença entre os operadores densidade. A figura (6.7) mostra a razão entre os tempos associados aos processos (1) e (2), t_1/t_2 , em função do parâmetro Δ . Realizando um *fit* com o programa *Origin* é possível mostrar que a dependência entre t_1/t_2 e Δ pode ser aproximada por meio de uma função exponencial:

$$\frac{t_1}{t_2} \approx ae^{b\Delta}, \quad (6.82)$$

com $a = 7.5486 \times 10^{-10}$ e $b = 1/0.07728$. Este resultado mostra que a forma mais eficiente de preparar um estado térmico em baixas temperaturas envolve o resfriamento do reservatório térmico [processo (2)], principalmente quando o valor de Δ for muito grande.

6.2 Considerações Finais

Neste Capítulo investigamos o processo de termalização associado a cadeias de spins unidimensionais devido a interação entre os spins e reservatórios térmicos bosônicos independentes ou coletivo. Tanto no caso do modelo Ising quanto do modelo XXZ conseguimos mostrar que existem certos regimes de parâmetros que

impedem a termalização do sistema, ou seja, dado um estado inicial arbitrário o estado estacionário (se existir) poderá não corresponder ao estado previsto pelo *Ensemble* de Gibbs. Observamos que isso ocorre inclusive no regime de altas temperaturas. No entanto, a nossa análise tem como ponto de partida a *hipótese* de que o sistema de interesse e o reservatório térmico estão *fracamente* acoplados. Logo, a validade dos nossos resultados está vinculada a validade desta aproximação.

Capítulo 7

Conclusões

Os resultados apresentados nesta tese estão associados a dois temas distintos. O primeiro, refere-se ao estudo da Discórdia Quântica, uma medida que procura quantificar todas as correlações quânticas existentes num estado quântico bipartido, enquanto que o segundo é voltado ao processo de termalização no âmbito dos sistemas quânticos abertos.

No que se refere a Discórdia Quântica, começamos estudando os aspectos dinâmicos das correlações quânticas entre dois qubits não-interagentes acoplados a reservatórios térmicos markovianos e não-markovianos. Os resultados oriundos desta etapa do trabalho, apresentados no Capítulo 3, constituem o primeiro estudo sobre o assunto e destacam uma importante característica da Discórdia Quântica: a sua resistência com relação aos efeitos do meio-ambiente. Como observado neste Capítulo, as correlações quânticas podem existir mesmo nas situações em que o emaranhamento desaparece completamente. Este é um importante resultado pois tendo em vista que existe a possibilidade de utilizar a Discórdia como recurso computacional, a sua resistência aos efeitos do meio-ambiente é fundamental para que os protocolos desenvolvidos a partir dela sejam realmente promissores.

Ainda com relação a Discórdia Quântica, investigamos no Capítulo 5 o comportamento das correlações quânticas entre dois spins pertencentes a uma cadeia unidimensional. Inicialmente consideramos um sistema formado por ape-

nas dois spins e calculamos a Discórdia Quântica associada ao estado térmico, obtido através do *ensemble* de Gibbs, associado a este sistema. Neste caso, conseguimos obter o comportamento tanto da Discórdia quanto do emaranhamento em função da temperatura e dos parâmetros que descrevem o Hamiltoniano do sistema, fornecendo o primeiro indício de que a Discórdia poderia ser utilizada para caracterizar os pontos críticos quânticos, presentes em $T = 0K$, no regime de temperaturas finitas. Este ponto foi investigado posteriormente, quando a nossa atenção foi direcionada para os modelos Ising, XY, e XXZ, todos no limite termodinâmico. Dessa forma, foi possível verificar que a Discórdia Quântica apresenta uma maior habilidade de detectar os pontos críticos quando comparada ao emaranhamento.

A parte final da tese foi destinada ao estudo do processo de termalização em sistemas quânticos abertos. Nesta etapa do trabalho, estudamos os modelos de Ising e XXZ assumindo um acoplamento *fraco* entre os spins e o meio-ambiente, modelado através de reservatórios térmicos bosônicos. Neste regime de acoplamento, utilizamos uma equação mestra para determinar a dinâmica do sistema e dessa forma verificar quando o estado estacionário do sistema resultava no estado previsto pelo *ensemble* de Gibbs. Em ambos os modelos estudados fomos capazes de encontrar regimes de parâmetros que inviabilizam a termalização, ou seja, encontramos situações onde existem distintos estados estacionários, onde o estado térmico é apenas um dos estados possíveis, e situações onde o sistema não apresenta um estado estacionário. Este intrigante comportamento foi observado tanto para $T = 0K$ quanto para temperaturas finitas. Embora a maior parte dos resultados tenha sido obtida considerando um sistema de dois spins interagentes, apresentamos também alguns casos em que a termalização não ocorre mesmo para uma cadeia de spins de tamanho arbitrário.

Finalmente, é importante ressaltar que os tópicos abordados nesta tese estão em pleno desenvolvimento e, portanto, ainda há muito trabalho a ser desenvolvido. Quanto à Discórdia Quântica, ainda não há um consenso sobre o seu papel na Teoria de Computação e Informação Quântica [5]. Muito disso se deve ao fato da Discórdia ser relevante apenas para processos de computação e informação quântica que envolvem estados mistos, tendo em vista que para

estados puros ela coincide com uma medida de emaranhamento. Portanto, acredito que com o desenvolvimento da computação quântica com estados mistos, ainda pouco estudada, poderemos determinar a real importância da Discórdia Quântica neste campo de estudo. No que diz respeito a relação entre correlações quânticas e transições de fase quânticas, os resultados apresentados nesta tese fornecem fortes indícios sobre a importância da Discórdia Quântica. No entanto, existem questões que ainda não foram respondidas como, por exemplo, o porque da Discórdia Quântica Térmica oferecer uma boa caracterização de alguns pontos críticos e não de outros.

Quanto à parte final da tese, acredito que os resultados referentes a termalização dos sistemas quânticos estudados são intrigantes e precisam ser compreendidos em maior profundidade. Vale lembrar que assumimos uma importante hipótese para deduzirmos a dinâmica do sistema, o acoplamento fraco entre o sistema e o reservatório, uma hipótese amplamente utilizada, principalmente no domínio da Óptica Quântica [13]. Portanto, dentro desta aproximação, os nossos resultados, embora intrigantes, estão corretos. No entanto, estes resultados parecem não estar de acordo com as diversas evidências experimentais em favor da Mecânica Estatística, embora existam experimentos atuais que indiquem a inexistência de termalização [138]. Este desacordo pode estar associado à hipótese de acoplamento fraco, como já mencionado, ou as características dos modelos estudados. Geralmente, os resultados experimentais correspondem a modelos mais complexos, tanto no que se refere às interações entre os constituintes quanto à dimensionalidade do sistema. Além disso, a existência de perturbações externas, como campos magnéticos de baixa intensidade, podem afetar drasticamente a dinâmica do sistema. Isso foi visto no Capítulo 6, onde mostramos que a simples existência de um campo na direção x (de intensidade arbitrária), além de um campo na direção z , já seria suficiente para assegurar a termalização de um sistema de dois spins descrito pelo modelo XXZ, acoplado a reservatórios térmicos independentes. Entre os nossos projetos futuros, pretendemos estudar a dinâmica no regime de acoplamento forte para verificar como o acoplamento influencia o processo de termalização.

Apêndice A

Medidas em Mecânica Quântica

Segundo um dos postulados da Mecânica Quântica, a evolução temporal do estado de um sistema quântico isolado $|\psi\rangle$ é determinada pela equação de Schrödinger [12]:

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle, \quad (\text{A.1})$$

onde \hat{H} é o Hamiltoniano que descreve o sistema. Este postulado só é válido quando aplicado a sistemas isolados. Porém, quando existe a necessidade de adquirir informações sobre o sistema, é necessário que observadores e seus aparatos de medida interajam com o sistema. Isso acaba violando a condição de isolamento e portanto a evolução acima não pode ser aplicada. Existem tentativas de descrever o que acontece num processo de medida através de uma abordagem que leva em conta a interação entre o sistema e o aparato [13; 63]. Embora essa abordagem seja bem difundida, ainda não há um consenso com relação a sua capacidade de descrever o processo de medida. A forma tradicional de introduzir o modo como as medidas afetam um sistema na Mecânica Quântica dá-se por meio do seguinte postulado [12]:

Postulado A.1 *As medidas quânticas são descritas por determinados operadores de medida $\{M_m\}$ que atuam sobre o espaço de estados do sistema. O índice “ m ” corresponde aos diferentes resultados da medida. Seja $|\psi\rangle$ o estado de um sistema quântico com $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Imediatamente antes da medida a probabilidade de um*

resultado m ocorrer é dada por:

$$p(m) = \langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle, \quad (\text{A.2})$$

e o estado após a medida será:

$$|\psi_m\rangle = \frac{M_m |\psi\rangle}{\sqrt{p(m)}}. \quad (\text{A.3})$$

Como $p(m) \geq 0$ e $\sum_m p(m) = 1$ tem-se que os operadores de medida devem satisfazer as relações:

$$M_m^\dagger M_m \geq 0 \quad e \quad \sum_m M_m^\dagger M_m = \mathbf{1}. \quad (\text{A.4})$$

Muitas vezes este Postulado é apresentado com uma condição adicional: $M_m^\dagger = M_m$ e $M_m M_n = \delta_{m,n} M_m$, ou seja, M_m são projetores ortogonais. Entretanto, existem situações em que é necessário o uso de medidas mais gerais do que as projetivas. O formalismo que dá conta de descrever essas medidas recebe o nome de formalismo POVM¹ [12]. Segundo o Postulado acima, se $|\psi\rangle$ descreve o estado de um sistema quântico e $\{M_m\}$ é um conjunto de operadores de medida, então a a probabilidade de um resultado m ocorrer é $p(m) = \langle \psi | E_m | \psi \rangle$, onde fez-se uso da definição $E_m \equiv M_m^\dagger M_m$ com $\sum_m E_m = \mathbf{1}$. Os operadores E_m são conhecidos como os elementos POVM associados à medida e o conjunto completo $\{E_m\}$ corresponde a um POVM. Para ilustrar o uso do formalismo POVM vamos adotar um exemplo retirado da Ref.[12]. Considere o seguintes estados quânticos escritos na base computacional: $|\psi_1\rangle = |0\rangle$ e $|\psi_2\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$. Estes estados não são ortogonais e portanto não é possível distingui-los através de uma medida [12]. No entanto, é possível propor uma medida que consiga distinguir estes estados algumas vezes, sem nunca cometer um erro de identificação. Para tanto, considere um conjunto POVM contendo três elementos:

$$E_1 \equiv \frac{\sqrt{2}}{1 + \sqrt{2}} |1\rangle \langle 1|, \quad (\text{A.5})$$

$$E_2 \equiv \frac{\sqrt{2}}{2 + 2\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle)(\langle 0| - \langle 1|), \quad (\text{A.6})$$

$$E_3 \equiv \mathbf{1} - E_1 - E_2. \quad (\text{A.7})$$

¹A sigla POVM refere-se à expressão em inglês “Positive Operator-Valued Measure”.

Estes operadores satisfazem a relação $\sum_{m=1}^3 E_m = \mathbf{1}$. Agora, suponha que um observador receba o estado $|\psi_1\rangle = |0\rangle$. Como $\langle\psi_1|E_1|\psi_1\rangle = 0$, a probabilidade de observar E_1 é igual a zero. Logo, se o resultado da medida de E_1 for diferente de zero, pode-se concluir que o estado recebido foi o $|\psi_2\rangle$. Da mesma forma, se a medida de E_2 for diferente de zero, pode-se concluir com certeza que o estado recebido foi o estado $|\psi_1\rangle$. Por outro lado, somente a medida de E_3 será diferente de zero, neste caso não se pode concluir nada a respeito do estado recebido. Portanto, a medida nem sempre fornece um resultado que permite concluir qual o estado recebido, ou seja, haverá um erro quanto a identificação do estado.

Um POVM pode ser conectado a um conjunto de projetores através do Teorema de Neumark [68]. Segundo este Teorema, se os elementos de um POVM, denotados por E_m , estão definidos em um espaço de Hilbert de dimensão p , \mathcal{H}_p , então é possível associá-los a um conjunto de projetores ortogonais P_m , definidos em um espaço de Hilbert estendido \mathcal{H}_q , de dimensão $q > p$, satisfazendo duas condições: 1) $\sum_m P_m = \mathbf{1}$ e 2) E_m é o resultado da projeção de $P_m \in \mathcal{H}_q$ em \mathcal{H}_p . Este resultado é muito útil, por exemplo, para demonstrar algumas propriedades referentes a Discórdia Quântica, como o Teorema 2.3 do Capítulo 2.

Apêndice B

Equação Mestra

O ponto de partida da teoria de sistemas abertos é o Hamiltoniano [13]:

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_R + \hat{H}_{SR}, \quad (\text{B.1})$$

onde \hat{H}_S e \hat{H}_R são, respectivamente, os Hamiltonianos do sistema S e do reservatório R , enquanto que H_{SR} descreve a interação entre eles. O sistema físico, descrito pelo Hamiltoniano \hat{H}_S , pode ser tanto um único átomo como um conjunto de átomos interagindo com um campo eletromagnético ou uma cadeia de spins, utilizada na modelagem de fenômenos magnéticos. O Hamiltoniano de interação pode ser escrito na forma

$$\hat{H}_{SR} = \sum_{\alpha} \hat{A}_{\alpha} \otimes \hat{B}_{\alpha}, \quad (\text{B.2})$$

onde \hat{A}_{α} e \hat{B}_{α} são operadores hermitianos que atuam sobre o espaço de Hilbert do sistema \mathcal{H}_S e do reservatório \mathcal{H}_R , respectivamente.

Como $S + R$ constitui um sistema isolado, desde que os efeitos do meio-ambiente sejam contemplados pelo Hamiltoniano \hat{H}_R , a evolução do operador densidade do sistema global $\rho_{SR}(t)$ é determinada pela equação de Liouville-Von Neumann [13]:

$$\frac{d}{dt}\rho_{SR}(t) = -i \left[\hat{H}, \rho_{SR} \right], \quad (\text{B.3})$$

onde assumimos $\hbar = 1$. Na representação de interação, obtida através da transformação unitária $U(t, t_0) = e^{-i(\hat{H}_S + \hat{H}_R)(t-t_0)}$, a equação anterior é reescrita da

seguinte forma:

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_{SR}(t) = -i \left[\tilde{H}(t), \tilde{\rho}_{SR} \right], \quad (\text{B.4})$$

onde $\tilde{\rho}_{SR}(t) = U^\dagger(t, 0)\rho_{SR}U(t, 0)$ e

$$\tilde{H}(t) = U^\dagger(t, 0)\hat{H}_{SR}U(t, 0) = \sum_{\alpha} \tilde{A}_{\alpha}(t) \otimes \tilde{B}_{\alpha}(t), \quad (\text{B.5})$$

com $\tilde{A}_{\alpha}(t) = e^{i\hat{H}_St}\hat{A}_{\alpha}e^{-i\hat{H}_St}$ e $\tilde{B}_{\alpha}(t) = e^{i\hat{H}_Rt}\hat{B}_{\alpha}e^{-i\hat{H}_Rt}$.

Para obter a dinâmica do operador densidade do sistema S , $\rho(t) = \text{Tr}_R\rho_{SR}(t)$, vamos utilizar o método desenvolvido por S. Nakajima e R. Zwanzig [13]. Considera-se dois projetores ortogonais, \mathcal{P} e \mathcal{Q} , definidos da seguinte maneira:

$$\mathcal{P}\rho_{SR} \equiv \text{Tr}_R(\rho_{SR}) \otimes \rho_R, \quad (\text{B.6})$$

$$\mathcal{Q}\rho_{SR} \equiv (\mathbf{1} - \mathcal{P})\rho_{SR}, \quad (\text{B.7})$$

onde $\rho_R \in \mathcal{H}_R$ descreve o estado do reservatório. Note que $\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$, $\mathcal{Q}^2 = \mathcal{Q}$, e $\mathcal{P}\mathcal{Q} = \mathcal{Q}\mathcal{P} = 0$. No que segue vamos assumir que o estado do reservatório é dado pelo *ensemble* de Gibbs:

$$\rho_R = \frac{e^{-\beta\hat{H}_R}}{\text{Tr}_R e^{-\beta\hat{H}_R}}, \quad (\text{B.8})$$

logo $\tilde{\rho}_R = \rho_R$. Como $\rho(t) = \text{Tr}_R(\mathcal{P}\rho_{SR})$, a dinâmica do sistema pode ser obtida a partir da dinâmica de $\mathcal{P}\rho_{SR}$. Portanto, aplicando os projetores \mathcal{P} e \mathcal{Q} na equação (B.4) tem-se que:

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(t) = -i\mathcal{P} \left[\tilde{H}(t), \tilde{\rho}_{SR} \right], \quad (\text{B.9})$$

$$\frac{d}{dt}\mathcal{Q}\tilde{\rho}_{SR}(t) = -i\mathcal{Q} \left[\tilde{H}(t), \tilde{\rho}_{SR} \right]. \quad (\text{B.10})$$

Agora, usando a notação $\mathcal{V}(t)(\bullet) = -i[\tilde{H}(t), \bullet]$ e introduzindo a identidade $\mathbf{1} = \mathcal{P} + \mathcal{Q}$ entre $\mathcal{V}(t)$ e $\tilde{\rho}_{SR}$ podemos reescrever as equações (B.9) e (B.10) da seguinte forma:

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(t) = \mathcal{P}\mathcal{V}(t)\mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(t) + \mathcal{P}\mathcal{V}(t)\mathcal{Q}\tilde{\rho}_{SR}(t), \quad (\text{B.11})$$

$$\frac{d}{dt}\mathcal{Q}\tilde{\rho}_{SR}(t) = \mathcal{Q}\mathcal{V}(t)\mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(t) + \mathcal{Q}\mathcal{V}(t)\mathcal{Q}\tilde{\rho}_{SR}(t). \quad (\text{B.12})$$

Os modelos tratados nesta Tese são tais que $\text{Tr}_R(\tilde{H}(t)\tilde{\rho}_R) = 0$, logo:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}\mathcal{V}(t)\mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(t) &= -i\text{Tr}_R \left[\tilde{H}(t), \tilde{\rho}_S(t) \otimes \rho_R \right] \otimes \rho_R \\ &= -i \left[\text{Tr}_R(\tilde{H}(t)\tilde{\rho}_R), \tilde{\rho}_S(t) \right] \otimes \rho_R = 0, \end{aligned}$$

mostrando que o primeiro termo do lado direito da equação (B.11) é igual a zero. A solução formal da equação (B.11) é dada por:

$$\mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(t) = \mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(0) + \int_0^t ds \mathcal{P}\mathcal{V}(s)\mathcal{Q}\tilde{\rho}_{SR}(s), \quad (\text{B.13})$$

enquanto que a solução formal da equação (B.12), obtida através do método de variação de parâmetros¹, pode ser escrita como:

$$\mathcal{Q}\tilde{\rho}_{SR}(t) = \mathcal{G}(t, 0)\mathcal{Q}\tilde{\rho}_{SR}(0) + \int_0^t ds \mathcal{G}(t, s)\mathcal{Q}\mathcal{V}(s)\mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(s), \quad (\text{B.15})$$

onde

$$G(t, s) = \mathcal{T}e^{\int_u^s dt' \mathcal{Q}\mathcal{V}(t')}. \quad (\text{B.16})$$

Substituindo a equação (B.15) na equação (B.13):

$$\begin{aligned} \mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(t) &= \mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(0) + \int_0^t ds \mathcal{P}\mathcal{V}(s)\mathcal{G}(s, 0)\tilde{\rho}_{SR}(0), \\ &+ \int_0^t ds \int_0^s du \mathcal{P}\mathcal{V}(s)\mathcal{G}(s, u)\mathcal{Q}\mathcal{V}(u)\tilde{\rho}_{SR}(u). \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

Vamos assumir também que o estado inicial do $S + R$ é descorrelacionado, ou seja, $\rho_{SR}(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_R$. Com isso,

$$\mathcal{Q}\tilde{\rho}_{SR}(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_R - \mathcal{P}(\rho_S(0) \otimes \rho_R) = 0.$$

¹Este método [156] permite obter a solução geral de uma equação diferencial não-homogênea da forma:

$$\frac{dy}{dx} + a(x)y = g(x). \quad (\text{B.14})$$

A solução desta equação é a soma da solução geral para $g(x) = 0$ (caso homogêneo) e uma solução particular para $g(x) \neq 0$. A solução para $g(x) = 0$ é $y_h(x) = e^{-\int_0^x ds a(s)}y(0)$. A solução particular $y_p(x)$ é obtida assumindo $y_p(x) = z(x)e^{-f(x)}$, onde $f(x) = \int_0^x ds' a(s')$. Substituindo y_p na equação (B.14) tem-se que:

$$\frac{dz}{dx} = e^{f(x)}g(x) \implies z(x) = \int_0^x ds e^{f(s)}g(s),$$

onde utilizou-se $z(0) = 0$ para satisfazer a condição inicial. Portanto,

$$y_p(x) = e^{-f(x)} \int_0^x ds e^{f(s)}g(s) = \int_0^x ds e^{-(f(x)-f(s))}g(s) = \int_0^x ds \mathcal{G}(x, s)g(s),$$

com

$$\mathcal{G}(x, s) = e^{-(f(x)-f(s))} = e^{-\int_s^x ds' a(s')}.$$

Logo, a solução da equação (B.14) pode ser escrita como:

$$y(x) = y_h(x) + y_p(x) = e^{-\int_0^x ds a(s)}y(0) + y_p(x) = \mathcal{G}(x, 0)y(0) + \int_0^x ds \mathcal{G}(x, s)g(s).$$

Usando esse resultado a equação (B.17) assume a forma:

$$\mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(t) = \mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(0) + \int_0^t ds \int_0^s du \mathcal{P}\mathcal{V}(s)\mathcal{G}(s,u)\mathcal{Q}\mathcal{V}(u)\tilde{\rho}_{SR}(u). \quad (\text{B.18})$$

Segundo a equação (B.4) é possível estabelecer a seguinte conexão entre os operadores densidade do sistema global nos tempos s e u (com $u \leq s$):

$$\tilde{\rho}_{SR}(s) = \tilde{U}(s,u)\tilde{\rho}_{SR}(u)\tilde{U}^\dagger(s,u) \Rightarrow \tilde{\rho}_{SR}(u) = \tilde{U}(u,s)^\dagger\tilde{\rho}_{SR}(s)\tilde{U}(u,s), \quad (\text{B.19})$$

onde $\tilde{U}(s,u)$ é dado pela série de Dyson [13]:

$$\begin{aligned} \tilde{U}(s,u) &= \mathcal{T}e^{-i\int_u^s dt' \tilde{H}(t')} \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_u^s dt_1 \int_u^{t_1} dt_2 \dots \int_u^{t_{n-1}} dt_n \mathcal{T}\tilde{H}(t_1)\tilde{H}(t_2)\dots\tilde{H}(t_n), \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

com \mathcal{T} denotando o operador de ordenamento temporal, responsável por assegurar o ordenamento $t_1 > t_2 > \dots > t_n$. Além disso,

$$\tilde{U}(u,s) = (\tilde{U}(s,u))^\dagger = \left[\mathcal{T}e^{-i\int_u^s dt' \tilde{H}(t')} \right]^\dagger = \mathcal{T}^* e^{i\int_u^s dt' \tilde{H}(t')}, \quad (\text{B.21})$$

onde \mathcal{T}^* representa o ordenamento na ordem inversa $t_1 < t_2 < \dots < t_n$. Introduzindo a equação (B.19) no último termo da equação (B.18):

$$\begin{aligned} \mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(t) &= \mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(0) \\ &+ \int_0^t ds \int_0^s du \mathcal{P}\mathcal{V}(s)\mathcal{G}(s,u)\mathcal{Q}\mathcal{V}(u)\tilde{U}(u,s)^\dagger\tilde{\rho}_{SR}(s)\tilde{U}(u,s). \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

Agora, redefinindo o Hamiltoniano de interação como $\tilde{H}(t) \rightarrow g\tilde{H}(t)$ (logo $\mathcal{V}(t) \rightarrow g\mathcal{V}(t)$), onde g é um parâmetro adimensional que controla a intensidade do acoplamento sistema-reservatório, e usando a expansão em série dos operadores $\tilde{U}(u,s)$ e $\mathcal{G}(s,u)$, obtemos a seguinte expressão:

$$\mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(t) = \mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(0) + g^2 \int_0^t ds \int_0^s du \mathcal{P}\mathcal{V}(s)\mathcal{Q}\mathcal{V}(u)\tilde{\rho}_{SR}(s) + \mathcal{O}(g^3).$$

Usando $\mathcal{Q} = \mathbf{1} - \mathcal{P}$ e $\mathcal{P}\mathcal{V}(s)\mathcal{P} = 0$, e fazendo a mudança de variáveis $u \rightarrow s - u$, a equação anterior pode ser escrita como:

$$\mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(t) = \mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(0) - g^2 \int_0^t ds \int_0^s du \mathcal{P}\mathcal{V}(s)\mathcal{V}(s-u)\tilde{\rho}_{SR}(s) + \mathcal{O}(g^3).$$

Escrevendo explicitamente as expressões de \mathcal{P} e \mathcal{V} , e tomando o traço parcial com relação as variáveis do reservatório obtemos a equação que descreve a dinâmica do operador densidade do sistema S :

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(t) &= \tilde{\rho}(0) - g^2 \int_0^t ds \int_0^s du \text{Tr}_R \left[\tilde{H}(s), \left[\tilde{H}(s-u), \tilde{\rho}(s) \otimes \rho_R \right] \right] \\ &+ \mathcal{O}(g^3). \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Assumindo que o espectro de energia do Hamiltoniano \hat{H}_S seja discreto, pode-se construir os operadores $\hat{A}_\alpha(\omega)$, definidos como:

$$\hat{A}_\alpha(\omega) \equiv \sum_{\epsilon' - \epsilon = \omega} \Pi(\epsilon) \hat{A}_\alpha \Pi(\epsilon'), \quad (\text{B.24})$$

onde $\hat{H}_S |\epsilon\rangle = \epsilon |\epsilon\rangle$ e $\Pi(\epsilon)$ é o projetor associado à autoenergia ϵ . Como \hat{A}_α é hermitiano é fácil ver que

$$\hat{A}_\alpha(\omega)^\dagger = \hat{A}_\alpha(-\omega). \quad (\text{B.25})$$

Além disso, como consequência da definição (B.24) tem-se também que:

$$\left[\hat{H}_S, \hat{A}_\alpha(\omega) \right] = -\omega \hat{A}_\alpha(\omega) \quad \text{e} \quad \left[\hat{H}_S, \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \right] = \omega \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega),$$

e

$$\left[\hat{H}_S, \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \hat{A}_\alpha(\omega) \right] = 0.$$

Somando sobre todas as diferenças de energia ω e usando a relação de completudeza $\sum_\epsilon \Pi(\epsilon) = \mathbf{1}$:

$$\begin{aligned} \sum_\omega \hat{A}_\alpha(\omega) &= \sum_\omega \sum_{\epsilon' - \epsilon = \omega} \Pi(\epsilon) \hat{A}_\alpha \Pi(\epsilon') \\ &= \sum_{\epsilon', \epsilon} \Pi(\epsilon) \hat{A}_\alpha \Pi(\epsilon') \\ &= \hat{A}_\alpha. \end{aligned}$$

Procedendo de forma análoga:

$$\sum_\omega \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) = \hat{A}_\alpha.$$

Na representação de interação os operadores $\hat{A}_\alpha(\omega)$ assumem a forma:

$$\begin{aligned} \tilde{A}_\alpha(\omega, t) &= e^{-i\omega t} \hat{A}_\alpha(\omega), \\ \tilde{A}_\alpha^\dagger(\omega, t) &= e^{i\omega t} \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega), \end{aligned}$$

portanto,

$$\tilde{A}_\alpha(t) = \sum_{\omega} e^{-i\omega t} \hat{A}_\alpha(\omega) \quad (\text{B.26})$$

$$= \sum_{\omega} e^{i\omega t} \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega). \quad (\text{B.27})$$

Com isso, o Hamiltoniano (B.5) assume a forma:

$$\tilde{H}(t) = \sum_{\omega} \sum_{\alpha} e^{-i\omega t} \hat{A}_\alpha(\omega) \otimes \tilde{B}_\alpha(t) = \sum_{\omega} \sum_{\alpha} e^{i\omega t} \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \otimes \tilde{B}_\alpha^\dagger(t). \quad (\text{B.28})$$

Usando o primeiro termo do lado direito da equação (B.28) para reescrever o termo $\tilde{H}(s-u)$ e o segundo termo para reescrever $\tilde{H}(s)$, a equação (B.23) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(t) &= \tilde{\rho}(0) + g^2 \int_0^t ds \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega' - \omega)s} \Gamma_{\alpha\beta}^s(\omega) \left[\hat{A}_\beta(\omega) \tilde{\rho}(s), \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega') \right] \\ &+ g^2 \int_0^t ds \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega - \omega')s} \Gamma_{\beta\alpha}^{s*}(\omega) \left[\hat{A}_\beta(\omega'), \tilde{\rho}(s) \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \right] \\ &+ \mathcal{O}(g^3), \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

onde

$$\Gamma_{\alpha\beta}^s(\omega) = \int_0^s du e^{i\omega u} \text{Tr}_R \left(\tilde{B}_\alpha(s) \tilde{B}_\beta(s-u) \rho_R \right). \quad (\text{B.30})$$

O próximo passo consiste em reescalar o tempo como $\tau = g^2 t$ e $\sigma = g^2 s$, de modo que:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(t) &= \tilde{\rho}(\tau/g^2) \\ &= \tilde{\rho}(0) + \int_0^\tau d\sigma \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega' - \omega)\sigma/g^2} \Gamma_{\alpha\beta}^{\sigma/g^2}(\omega) \left[\hat{A}_\beta(\omega) \tilde{\rho}(\sigma/g^2), \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega') \right] \\ &+ \int_0^\tau d\sigma \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega - \omega')\sigma/g^2} \Gamma_{\beta\alpha}^{\sigma/g^2*}(\omega) \left[\hat{A}_\beta(\omega'), \tilde{\rho}(\sigma/g^2) \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \right] \\ &+ \mathcal{O}(g), \end{aligned}$$

onde τ é a escala de tempo do sistema devido a interação com o reservatório.

Utilizando a definição $\tilde{\rho}(\tau) \equiv \lim_{g \rightarrow 0} \tilde{\rho}(t)$:

$$\begin{aligned}
\tilde{\rho}(\tau) &= \tilde{\rho}(0) + \lim_{g \rightarrow 0} \int_0^\tau d\sigma \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega' - \omega)\sigma/g^2} \Gamma_{\alpha\beta}^{\sigma/g^2}(\omega) \left[\hat{A}_\beta(\omega) \tilde{\rho}(\sigma/g^2), \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega') \right] \\
&+ \lim_{g \rightarrow 0} \int_0^\tau d\sigma \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega - \omega')\sigma/g^2} \Gamma_{\beta\alpha}^{\sigma/g^2*}(\omega) \left[\hat{A}_\beta(\omega'), \tilde{\rho}(\sigma/g^2) \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \right] \\
&+ \lim_{g \rightarrow 0} \mathcal{O}(g) \\
&= \tilde{\rho}(0) + \lim_{g \rightarrow 0} \int_0^\tau d\sigma \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega' - \omega)\sigma/g^2} \Gamma_{\alpha\beta}^{\sigma/g^2}(\omega) \left[\hat{A}_\beta(\omega) \tilde{\rho}(\sigma), \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega') \right] \\
&+ \lim_{g \rightarrow 0} \int_0^\tau d\sigma \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega - \omega')\sigma/g^2} \Gamma_{\beta\alpha}^{\sigma/g^2*}(\omega) \left[\hat{A}_\beta(\omega'), \tilde{\rho}(\sigma) \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \right]. \quad (\text{B.31})
\end{aligned}$$

Para simplificar essa equação faremos uso do seguinte lema [74]:

Lema de Riemann-Lebesgue: *Seja $f(t)$ uma função integrável no intervalo $[a, b]$, então*

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \int_a^b dt e^{ixt} f(t) = 0.$$

Com isso, os termos oscilantes com $\omega \neq \omega'$, presentes na equação (B.31), tendem a zero no limite de acoplamento fraco, $g \rightarrow 0$. Esta aproximação é conhecida como *aproximação secular* e possui o mesmo intuito da aproximação de onda girante [13]. Desta forma,

$$\begin{aligned}
\tilde{\rho}(\tau) &= \tilde{\rho}(0) + \int_0^\tau d\sigma \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \Gamma_{\alpha\beta}^\infty(\omega) \left[\hat{A}_\beta(\omega) \tilde{\rho}(\sigma), \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega') \right] \\
&+ \int_0^\tau d\sigma \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \Gamma_{\beta\alpha}^{\infty*}(\omega) \left[\hat{A}_\beta(\omega'), \tilde{\rho}(\sigma) \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \right] \\
&\equiv \tilde{\rho}(0) + \int_0^\tau d\sigma \tilde{\mathcal{L}}[\tilde{\rho}(\sigma)], \quad (\text{B.32})
\end{aligned}$$

resultando na equação diferencial:

$$\frac{d}{d\tau} \tilde{\rho}(\tau) = \tilde{\mathcal{L}}[\tilde{\rho}(\tau)] \implies \tilde{\rho}(\tau) = e^{\tilde{\mathcal{L}}\tau}[\tilde{\rho}(0)]. \quad (\text{B.33})$$

B.1 Função de Correlação

Como $[\hat{H}_R, \rho_R] = 0$ tem-se que:

$$\begin{aligned}
\text{Tr}_R \left(\tilde{B}_\alpha(s) \tilde{B}_\beta(s-u) \rho_R \right) &= \text{Tr}_R \left(e^{i\hat{H}_R s} \tilde{B}_\alpha(0) e^{-i\hat{H}_R s} e^{i\hat{H}_R(s-u)} \tilde{B}_\beta(0) e^{-i\hat{H}_R(s-u)} \rho_R \right) \\
&= \text{Tr}_R \left(\tilde{B}_\alpha(u) \hat{B}_\beta \rho_R \right),
\end{aligned}$$

com $\hat{B}_\beta = \hat{B}_\beta(0)$. Logo,

$$\Gamma_{\alpha\beta}^\infty(\omega) = \int_0^\infty du e^{i\omega u} \text{Tr}_R \left(\tilde{B}_\alpha(u) \hat{B}_\beta \rho_R \right). \quad (\text{B.34})$$

Para que esta integral seja convergente, a função de correlação do reservatório $\text{Tr}_R \left(\tilde{B}_\alpha(u) \hat{B}_\beta \rho_R \right)$ deve decrescer conforme u aumenta. Entretanto, escrevendo o operador $\hat{B}_\alpha(u)$ em termos dos autoestados do Hamiltoniano do reservatório² \hat{H}_R observa-se que:

$$\text{Tr}_R \left(\tilde{B}_\alpha(u) \hat{B}_\beta \rho_R \right) = \sum_\omega e^{-i\omega u} \text{Tr}_R \left(\hat{B}_\alpha(\omega) \hat{B}_\beta \rho_R \right), \quad (\text{B.35})$$

mostrando que esta função de correlação é periódica em u . Portanto, a sua integral com o limite de integração tendendo a infinito irá divergir. Para eliminar a periodicidade é necessário tomar o *limite do contínuo*, ou seja, assumir que o reservatório R possui infinitos graus de liberdade [74], de forma tal que o espectro de \hat{H}_R seja contínuo. Neste caso,

$$\begin{aligned} \text{Tr}_R \left(\tilde{B}_\alpha(u) \hat{B}_\beta \rho_R \right) &= \sum_\omega e^{-i\omega u} \text{Tr}_R \left(\hat{B}_\alpha(\omega) \hat{B}_\beta \rho_R \right) \\ &\longrightarrow \int_{-a}^a d\omega e^{-i\omega u} \text{Tr}_R \left(\hat{B}_\alpha(\omega) \hat{B}_\beta \rho_R \right), \end{aligned}$$

onde a representa uma frequência de corte (podendo ser infinita). Com isso,

$$\lim_{u \rightarrow \infty} \text{Tr}_R \left(\tilde{B}_\alpha(u) \hat{B}_\beta \rho_R \right) = \lim_{u \rightarrow \infty} \int_{-a}^a d\omega e^{-i\omega u} \text{Tr}_R \left(\hat{B}_\alpha(\omega) \hat{B}_\beta \rho_R \right) = 0,$$

devido ao Lema de Riemann-Lebesgue. Embora um número infinito de graus de liberdade seja uma condição necessária para que a integral (B.34) exista, ela não é um condição suficiente. O seguinte teorema fornece uma condição suficiente para existência desta integral [74]:

Teorema de Davis: *Se existe um $\delta > 0$ tal que*

$$\int_0^\infty dt \left| \text{Tr}_R \left(\tilde{B}_\alpha(t) \hat{B}_\beta \rho_R \right) \right| (1-t)^\delta < \infty,$$

²Adotando o mesmo procedimento empregado na dedução das equações (B.26) e (B.27) obtemos o seguinte resultado:

$$\begin{aligned} \tilde{B}_\alpha(u) &= \sum_\omega e^{-i\omega u} \hat{B}_\alpha(\omega) \\ &= \sum_\omega e^{i\omega u} \hat{B}_\alpha^\dagger(\omega), \end{aligned}$$

onde $\hbar\omega = \epsilon'_R - \epsilon_R$, com $\hat{H}_R |\epsilon_R\rangle = \epsilon_R |\epsilon_R\rangle$. Adotamos $\hbar = 1$.

então o limite de acomplamento fraco é bem definido e

$$\lim_{\substack{g \rightarrow 0 \\ \tau = g^2 t}} \left\| \tilde{\mathcal{E}}_{(\tau,0)}[\tilde{\rho}(0)] - e^{\tilde{\mathcal{L}}\tau}[\tilde{\rho}(0)] \right\|_1 = 0,$$

para toda condição inicial $\tilde{\rho}(0)$, onde $\tilde{\mathcal{E}}_{(\tau,0)}$ denota a dinâmica exata do sistema S na representação de interação³.

B.2 Equação Mestra Markoviana

Como consequência da aproximação secular a equação (B.33) descreve uma *equação mestra markoviana* [74]. Portanto, para g pequeno, mas finito, pode-se aproximar a dinâmica exata do sistema, $\tilde{\mathcal{E}}_{(\tau,0)}$, pela evolução markoviana $e^{\tilde{\mathcal{L}}\tau} = e^{g^2 \tilde{\mathcal{L}}t}$, onde o erro introduzido pela aproximação é limitado e tende a zero conforme $g \rightarrow 0$. A função de correlação pode ser reescrita através da expressão:

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{\infty}(\omega) = \frac{1}{2} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) + i S_{\alpha\beta}(\omega),$$

onde os coeficientes

$$S_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{2i} [\Gamma_{\alpha\beta}^{\infty}(\omega) - \Gamma_{\alpha\beta}^{\infty*}(\omega)],$$

e

$$\begin{aligned} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) &= \Gamma_{\alpha\beta}^{\infty}(\omega) + \Gamma_{\alpha\beta}^{\infty*}(\omega) \\ &= \int_0^{\infty} du e^{i\omega u} \text{Tr}_R \left(\tilde{B}_{\alpha}(u) \hat{B}_{\beta} \rho_R \right) + \int_0^{\infty} du e^{-i\omega u} \text{Tr}_R \left(\tilde{B}_{\alpha}(-u) \hat{B}_{\beta} \rho_R \right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} du e^{i\omega u} \text{Tr}_R \left(\tilde{B}_{\alpha}(u) \hat{B}_{\beta} \rho_R \right), \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

formam matrizes hermitianas. Em termos destas quantidades a equação (B.33) é escrita como:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \tilde{\rho}(\tau) &= -i \left[\hat{H}_{LS}, \tilde{\rho}(\tau) \right] \\ &+ \sum_{\omega} \sum_{\alpha\beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[\hat{A}_{\beta}(\omega) \tilde{\rho}(\tau) \hat{A}_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ \hat{A}_{\alpha}^{\dagger}(\omega) \hat{A}_{\beta}(\omega), \tilde{\rho}(\tau) \right\} \right], \end{aligned}$$

com o Hamiltoniano

$$\hat{H}_{LS} = \sum_{\omega} \sum_{\alpha\beta} S_{\alpha\beta}(\omega) \hat{A}_{\alpha}^{\dagger}(\omega) \hat{A}_{\beta}(\omega') \quad (\text{B.37})$$

³ $\left\| \hat{A} \right\|_1 = \text{Tr} \sqrt{\hat{A}^{\dagger} \hat{A}}$.

sendo chamado de *Hamiltoniano de Lamb-shift*. Voltando à representação de Schrödinger através da transformação unitária $e^{-i\hat{H}_S t}$, finalmente obtemos a equação mestra que governa a dinâmica do sistema:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) &= -i \left[\hat{H}_S + g^2 \hat{H}_{LS}, \rho(t) \right] \\ &+ g^2 \sum_{\omega} \sum_{\alpha\beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[\hat{A}_{\beta}(\omega)\rho(t)\hat{A}_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ \hat{A}_{\alpha}^{\dagger}(\omega)\hat{A}_{\beta}(\omega), \rho(t) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

Como \hat{H}_{LS} comuta com \hat{H}_S ele introduz um *shift* nos níveis de energia do sistema S . Note que os coeficientes $S_{\alpha\beta}(\omega)$ dependem tanto das flutuações quânticas em $T = 0K$ quanto das flutuações térmicas presentes quando $T > 0$. Portanto, na análise da dinâmica dos sistemas de interesse o termo referente ao *Lamb-shift* será desconsiderado⁴.

B.3 Estado Estacionário

O objetivo desta seção é mostrar que o estado do sistema S determinado pelo *ensemble* de Gibbs:

$$\rho_T = \frac{e^{-\beta\hat{H}_S}}{Z}, \quad (\text{B.39})$$

com $Z = \text{Tr}_S \left(e^{-\beta\hat{H}_S} \right)$, é um estado estacionário da equação mestra (B.38), ou seja

$$\frac{d}{dt}\rho_T = 0, \quad (\text{B.40})$$

se o estado do reservatório ρ_R for dado pela equação (B.8). Para demonstrar este resultado, é necessário provar inicialmente que $\gamma_{\alpha\beta}(\omega) = e^{\beta\omega}\gamma_{\beta\alpha}(-\omega)$, conhecida como *condição de Kubo-Martin-Schwinger* (KMS) [13]. Para tanto, note que:

$$\begin{aligned} \left\langle \tilde{B}_{\alpha}(u)\hat{B}_{\beta} \right\rangle &= \text{Tr}_R \left(\rho_R \tilde{B}_{\alpha}(u)\hat{B}_{\beta} \right) \\ &= \frac{1}{\text{Tr}_R \left(e^{-\beta\hat{H}_R} \right)} \text{Tr}_R \left(e^{i\hat{H}_R(u+i\beta)} \tilde{B}_{\alpha} e^{-i\hat{H}_R u} \hat{B}_{\beta} \right) \\ &= \frac{1}{\text{Tr}_R \left(e^{-\beta\hat{H}_R} \right)} \text{Tr}_R \left(\hat{B}_{\beta} e^{i\hat{H}_R(u+i\beta)} \tilde{B}_{\alpha} e^{-i\hat{H}_R(u+i\beta)} e^{-\beta\hat{H}_R} \right) \\ &= \left\langle \hat{B}_{\beta} \tilde{B}_{\alpha}(u+i\beta) \right\rangle. \end{aligned}$$

⁴Este termo pode contribuir se a aproximação secular não for aplicada, como discutido recentemente na Ref. [157].

Usando este resultado e a decomposição (??) em termos dos operadores $\hat{B}(\omega')$, o coeficiente $\gamma_{\alpha\beta}(\omega)$ pode ser calculado da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
\gamma_{\alpha\beta}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} du e^{i\omega u} \text{Tr}_R \left(\tilde{B}_\alpha(u) \hat{B}_\beta \rho_R \right) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} du e^{i\omega u} \text{Tr}_R \left(\hat{B}_\beta \tilde{B}_\alpha(u + i\beta) \rho_R \right) \\
&= \int_{-a}^a d\omega' e^{\beta\omega'} \int_{-\infty}^{\infty} du e^{i(\omega - \omega')u} \text{Tr}_R \left(\hat{B}_\beta \hat{B}_\alpha(\omega') \rho_R \right) \\
&= 2\pi \int_{-a}^a d\omega' e^{\beta\omega'} \delta(\omega - \omega') \text{Tr}_R \left(\hat{B}_\beta \hat{B}_\alpha(\omega') \rho_R \right) \\
&= 2\pi e^{\beta\omega} \text{Tr}_R \left(\hat{B}_\beta \hat{B}_\alpha(\omega) \rho_R \right) = 2\pi e^{\beta\omega} \left[\text{Tr}_R \left(\hat{B}_\alpha^\dagger(\omega) \hat{B}_\beta \rho_R \right) \right]^* \\
&= 2\pi e^{\beta\omega} \left[\text{Tr}_R \left(\hat{B}_\alpha(-\omega) \hat{B}_\beta \rho_R \right) \right]^*,
\end{aligned}$$

mas

$$\begin{aligned}
2\pi \text{Tr}_R \left(\hat{B}_\alpha(-\omega) \hat{B}_\beta \rho_R \right) &= 2\pi \int_{-a}^a d\omega' \delta(\omega + \omega') \text{Tr}_R \left(\hat{B}_\alpha(\omega') \hat{B}_\beta \rho_R \right) \\
&= \int_{-a}^a d\omega' \int_{-\infty}^{\infty} du e^{i(\omega + \omega')u} \text{Tr}_R \left(\hat{B}_\alpha(\omega') \hat{B}_\beta \rho_R \right) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} du e^{i(\omega)u} \text{Tr}_R \left(\tilde{B}_\alpha(u) \hat{B}_\beta \rho_R \right) \\
&= \gamma_{\alpha\beta}(-\omega)
\end{aligned}$$

logo

$$\begin{aligned}
\gamma_{\alpha\beta}(\omega) &= 2\pi e^{\beta\omega} \left[\text{Tr}_R \left(\hat{B}_\alpha(-\omega) \hat{B}_\beta \rho_R \right) \right]^* = e^{\beta\omega} \gamma_{\alpha\beta}^*(-\omega) \\
&= e^{\beta\omega} \gamma_{\beta\alpha}(-\omega),
\end{aligned}$$

concluindo a demonstração da condição KMS.

Para ver que $\frac{d}{dt}\rho_T = 0$ observe primeiramente que ρ_T comuta com \hat{H}_S , logo o primeiro termo do lado direito da equação (B.38) é igual a zero. Para mostrar que o segundo termo é nulo note que:

$$\begin{aligned}
\rho_T \hat{A}_\alpha(\omega) &= \frac{e^{-\beta\hat{H}_S}}{Z} \sum_{\epsilon' - \epsilon = \omega} \Pi(\epsilon) \hat{A}_\alpha \Pi(\epsilon') \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{\epsilon' - \epsilon = \omega} e^{-\beta\epsilon} \Pi(\epsilon) \hat{A}_\alpha \Pi(\epsilon') e^{\beta\hat{H}_S} e^{-\beta\hat{H}_S} \\
&= \sum_{\epsilon' - \epsilon = \omega} e^{-\beta\epsilon} \Pi(\epsilon) \hat{A}_\alpha \Pi(\epsilon') e^{\beta\epsilon'} \rho_T \\
&= e^{\beta\omega} \hat{A}_\alpha(\omega) \rho_T,
\end{aligned}$$

analogamente

$$\rho_T \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) = e^{-\beta\omega} \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \rho_T.$$

Usando estas relações:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_T &= g^2 \sum_\omega \sum_{\alpha\beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[\hat{A}_\beta(\omega) \rho_T \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \hat{A}_\beta(\omega), \rho_T \right\} \right] \\ &= g^2 \sum_\omega \sum_{\alpha\beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[e^{-\beta\omega} \hat{A}_\beta(\omega) \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \rho_T - \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \hat{A}_\beta(\omega) \rho_T \right] \\ &= g^2 \sum_\omega \sum_{\alpha\beta} \left[\gamma_{\alpha\beta}(\omega) e^{-\beta\omega} \hat{A}_\beta^\dagger(-\omega) \hat{A}_\alpha(-\omega) - \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \hat{A}_\beta(\omega) \right] \rho_T \\ &= g^2 \sum_\omega \sum_{\alpha\beta} \gamma_{\beta\alpha}(-\omega) \hat{A}_\beta^\dagger(-\omega) \hat{A}_\alpha(-\omega) \rho_T - g^2 \sum_\omega \sum_{\alpha\beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \hat{A}_\beta(\omega) \rho_T. \end{aligned}$$

Aplicando a mudança de variáveis $\alpha \leftrightarrow \beta$ no primeiro termo da equação anterior:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_T &= g^2 \sum_\omega \sum_{\alpha\beta} \left[\gamma_{\alpha\beta}(-\omega) \hat{A}_\alpha^\dagger(-\omega) \hat{A}_\beta(-\omega) - \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \hat{A}_\alpha^\dagger(\omega) \hat{A}_\beta(\omega) \right] \rho_T \\ &= 0, \end{aligned}$$

pois a soma em ω varia de $-\omega_{max}$ até ω_{max} para alguma diferença de energia máxima $\hbar\omega_{max}$ ($\hbar = 1$). Isto prova que ρ_T é um estado estacionário. Entretanto, ele não é necessariamente o único estado estacionário.

B.4 Reservatório Térmico Bosônico

Neste momento vamos supor que o Hamiltoniano (B.1) possua a forma:

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_R + \hat{A} \otimes \sum_k (g_k \hat{b}_k + g_k^* \hat{b}_k^\dagger), \quad (\text{B.41})$$

onde o Hamiltoniano do reservatório $\hat{H}_R = \sum_k \omega_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k$ descreve um conjunto de osciladores harmônicos independentes com ω_k denotando a energia do k -ésimo oscilador (assumindo $\hbar = 1$). O parâmetro g_k descreve o acoplamento entre o sistema e o k -ésimo oscilador.

Comparando este Hamiltoniano total com as equações (B.1) e (B.2) nota-se que $\alpha = 1$ e $\hat{B} = \sum_k g_k (\hat{b}_k + \hat{b}_k^\dagger)$. Portanto, a equação (B.36) pode ser escrita como:

$$\gamma(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{i\omega u} \text{Tr}_R \left(\tilde{B}(u) B(0) \rho_R \right), \quad (\text{B.42})$$

onde

$$\tilde{B}(u) = \sum_k (g_k \hat{b}_k e^{-i\omega_k u} + g_k^* \hat{b}_k^\dagger e^{i\omega_k u}). \quad (\text{B.43})$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \text{Tr}_R \left(\tilde{B}(u) B(0) \rho_R \right) &= \sum_{k,k'} \left(g_k^* g_{k'} \langle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'} \rangle e^{i\omega_k u} + g_k^* g_{k'}^* \langle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'}^\dagger \rangle e^{i\omega_k u} \right) \\ &+ \sum_{k,k'} \left(g_k g_{k'} \langle \hat{b}_k \hat{b}_{k'} \rangle e^{-i\omega_k u} + g_k g_{k'}^* \langle \hat{b}_k \hat{b}_{k'}^\dagger \rangle e^{-i\omega_k u} \right). \end{aligned}$$

As médias dos operadores bosônicos acima são dadas por (para $\rho_R = e^{-\beta \hat{H}_R} / Z$):

$$\begin{aligned} \langle \hat{b}_k \hat{b}_{k'} \rangle &= \langle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'}^\dagger \rangle = 0, \\ \langle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'} \rangle &= \delta_{k,k'} N(\omega_k), \\ \langle \hat{b}_k \hat{b}_{k'}^\dagger \rangle &= \delta_{k,k'} [1 + N(\omega_k)], \end{aligned}$$

com

$$N(\omega_k) = \frac{1}{e^{\beta\omega_k} - 1},$$

denotando a distribuição de Planck, ou seja, o número médio de excitações no oscilador de frequência ω_k . Assim,

$$\text{Tr}_R \left(\tilde{B}(u) B(0) \rho_R \right) = \sum_k |g_k|^2 [N(\omega_k) e^{i\omega_k u} + (1 + N(\omega_k)) e^{-i\omega_k u}].$$

Supondo que as características do reservatório sejam descritas pela densidade espectral $f(\omega)$, a somatória na expressão acima pode ser substituída por uma integral em relação a $\omega' \geq 0$:

$$\begin{aligned} \text{Tr}_R \left(\tilde{B}(u) B(0) \rho_R \right) &= \int_0^\infty d\omega' f(\omega') N(\omega') e^{i\omega' u} \\ &+ \int_0^\infty d\omega' f(\omega') [1 + N(\omega')] e^{-i\omega' u}. \end{aligned}$$

Substituindo esse resultado na equação (B.42) e levando em conta que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} du e^{ixu} = 2\pi\delta(x),$$

obtemos que:

$$\begin{aligned}
\gamma(\omega) &= \int_0^\infty d\omega' f(\omega') N(\omega') \int_{-\infty}^\infty du e^{i(\omega'+\omega)u} \\
&+ \int_0^\infty d\omega' f(\omega') [1 + N(\omega')] \int_{-\infty}^\infty du e^{i(\omega-\omega')u} \\
&= 2\pi \int_0^\infty d\omega' f(\omega') N(\omega') \delta(\omega + \omega') \\
&+ 2\pi \int_0^\infty d\omega' f(\omega') [1 + N(\omega')] \delta(\omega - \omega'). \tag{B.44}
\end{aligned}$$

Se $\omega > 0$ então, como $\omega' > 0$, tem-se que $\delta(\omega + \omega') = 0$ e portanto

$$\begin{aligned}
\gamma(\omega > 0) &= 2\pi \int_0^\infty d\omega' f(\omega') [1 + N(\omega')] \delta(\omega - \omega') \\
&= 2\pi f(\omega) [1 + N(\omega)]. \tag{B.45}
\end{aligned}$$

Caso $\omega < 0$ então podemos escrevê-la como $\omega = -|\omega|$ e dessa forma $\delta(\omega' - \omega) = \delta(\omega' + |\omega|) = 0$. Portanto

$$\begin{aligned}
\gamma(\omega < 0) &= 2\pi \int_0^\infty d\omega' f(\omega') N(\omega') \delta(\omega + \omega') \\
&= 2\pi \int_0^\infty d\omega' f(\omega') N(\omega') \delta(\omega' - |\omega|) \\
&= 2\pi f(|\omega|) N(|\omega|). \tag{B.46}
\end{aligned}$$

Com isso, a equação mestra (B.38) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \rho(t) &= -i \left[\hat{H}_S + \hat{H}_{LS}, \rho(t) \right] \\
&+ \gamma(0) \left[\hat{A}(0) \rho(t) \hat{A}^\dagger(0) - \frac{1}{2} \left\{ \hat{A}^\dagger(0) \hat{A}(0), \rho(t) \right\} \right] \\
&+ 2\pi \sum_{\omega>0} f(\omega) [1 + N(\omega)] \left[\hat{A}(\omega) \rho(t) \hat{A}^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ \hat{A}^\dagger(\omega) \hat{A}(\omega), \rho(t) \right\} \right] \\
&+ 2\pi \sum_{\omega>0} f(\omega) N(\omega) \left[\hat{A}^\dagger(\omega) \rho(t) \hat{A}(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ \hat{A}(\omega) \hat{A}^\dagger(\omega), \rho(t) \right\} \right]. \tag{B.47}
\end{aligned}$$

É importante lembrar que esta equação mestra foi deduzida no limite de acoplamento fraco e, dessa forma, a densidade espectral $f(\omega)$ deve ser escolhida de tal maneira que este limite seja contemplado. Outro ponto que deve ser considerado diz respeito ao coeficiente $\gamma(0)$, definido como:

$$\gamma(0) \equiv 2\pi \lim_{\omega \rightarrow 0} \gamma(\omega). \tag{B.48}$$

Para que este limite exista é necessário que $\lim_{\omega \rightarrow 0} = \lim_{\omega \rightarrow 0^+} = \lim_{\omega \rightarrow 0^-}$, onde 0^+ indica que a função se aproxima de zero a partir de valores positivos de ω enquanto que 0^- indica uma aproximação a partir de valores negativos de ω . Mas para $\omega > 0$ tem-se $\gamma(\omega) = 2\pi f(|\omega|) [1 + N(|\omega|)]$ e para $\omega < 0$ tem-se $\gamma(|\omega|) = 2\pi f(|\omega|)N(|\omega|)$. Portanto, em princípio, este limite estaria bem definido apenas para $kT \gg \hbar\omega$, quando $1 + N(|\omega|) \approx N(|\omega|)$. Uma forma de contornar este problema consiste em assumir que $\lim_{\omega \rightarrow 0} f(\omega) = 0$, uma hipótese natural dado que um modo com frequência zero não tem nenhuma energia e não influencia o sistema. Neste caso o limite (B.48) resulta em

$$\gamma(0) \equiv 2\pi \lim_{\omega \rightarrow 0} \gamma(\omega) = 2\pi \lim_{\omega \rightarrow 0} f(|\omega|)N(|\omega|). \quad (\text{B.49})$$

Como $N(|\omega|) \rightarrow 1/|\omega| \rightarrow \infty$ conforme ω tende a zero, se $f(|\omega|)$ não tende a zero linearmente em ω (como na densidade Ôhmica) o valor de $\gamma(0)$ pode ser zero ou infinito. Este fato impõe uma forte restrição na forma da densidade espectral utilizada na modelagem do fenômeno de defasagem no limite de acoplamento fraco.

B.5 Reservatórios Térmicos Independentes

O objetivo agora é mostrar qual a forma da equação mestra quando o sistema S interage com N_R reservatórios térmicos independentes. O Hamiltoniano que descreve este modelo é dado pela seguinte expressão:

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_R + \hat{H}_{SR}, \quad (\text{B.50})$$

com

$$\hat{H}_R = \sum_{j=1}^{N_R} \hat{H}_{R_j} \quad \text{e} \quad \hat{H}_{SR} = \sum_{j=1}^{N_R} g_j \hat{H}_{SR_j}, \quad (\text{B.51})$$

onde \hat{H}_{R_j} é o Hamiltoniano do j -ésimo reservatório e $\hat{H}_{SR_j} = \hat{A}_j \otimes \sum_k (g_{k,j} \hat{b}_{k,j} + g_{k,j}^* \hat{b}_{k,j}^\dagger)$ descreve a interação do sistema com o j -ésimo reservatório. O operador de aniquilação associado ao k -ésimo modo do j -ésimo reservatório é denotado por $\hat{b}_{k,j}$. A intensidade do acoplamento entre o sistema e o j -ésimo reservatório é controlada através do parâmetro adimensional g_j . Como os reservatórios são

independentes tem-se que $[\hat{H}_{R_i}, \hat{H}_{R_j}] = 0$. Na representação de interação, o Hamiltoniano (B.50) é dado por $\tilde{H}(t) = \sum_{j=1}^{N_R} g_j \tilde{H}_j(t)$ com:

$$\tilde{H}_j(t) = \tilde{A}_j(t) \otimes \sum_k (g_{k,j} \hat{b}_{k,j} e^{-i\omega_k t} + g_{k,j}^* \hat{b}_{k,j}^\dagger e^{i\omega_k t}).$$

Substituindo $\tilde{H}(t)$ na equação (B.22) e utilizando novamente a expansão em série dos operadores $\tilde{U}(u, s)$ e $\mathcal{G}(s, u)$, encontramos a seguinte equação:

$$\mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(t) = \mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(0) + \sum_{i,j=1}^{N_R} g_i g_j \int_0^t ds \int_0^s du \mathcal{P}\mathcal{V}_i(s) \mathcal{Q}\mathcal{V}_j(u) \tilde{\rho}_{SR}(s) + \mathcal{O}(g_j^3),$$

onde $\mathcal{V}_j(t)(\bullet) = [\tilde{H}_j(t), \bullet]$. Usando $\mathcal{Q} = \mathbf{1} - \mathcal{P}$ e $\mathcal{V}(t)\mathcal{P}\mathcal{V}(t) = 0$, a equação anterior pode ser reescrita como:

$$\mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(t) = \mathcal{P}\tilde{\rho}_{SR}(0) + \sum_{i,j=1}^{N_R} g_i g_j \int_0^t ds \int_0^s du \mathcal{P}\mathcal{V}_i(s) \mathcal{V}_j(u) \tilde{\rho}_{SR}(s) + \mathcal{O}^3.$$

Tomando o traço parcial com relação as variáveis de reservatório e usando $\rho_R = \rho_{R_1} \otimes \dots \otimes \rho_{R_{N_R}}$, onde $\rho_{R_j} = e^{-\beta_j \hat{H}_{R_j}} / Z$ com $Z = \text{Tr}_{R_j} (e^{-\beta_j \hat{H}_{R_j}})$ descreve o estado do j -ésimo reservatório, encontramos a seguinte equação para a dinâmica do operador densidade do sistema:

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}(0) - \sum_{i,j} g_i g_j \int_0^t ds \int_0^s du \text{Tr}_R [\tilde{H}_i(s), [\tilde{H}_j(u), \tilde{\rho}(u) \otimes \rho_R]] \quad (\text{B.52})$$

onde

$$\begin{aligned} \text{Tr}_R [\tilde{H}_i(s), [\tilde{H}_j(u), \tilde{\rho}_{SR}(u)]] &= \text{Tr}_{R_i} \text{Tr}_{R_j} [\tilde{H}_i(s), [\tilde{H}_j(u), \tilde{\rho}(u) \rho_{R_i} \rho_{R_j}]] \\ &= \text{Tr}_{R_i} \text{Tr}_{R_j} [\tilde{H}_i(s) \tilde{H}_j(u) \tilde{\rho}(u) \rho_{R_i} \rho_{R_j}] \\ &\quad - \text{Tr}_{R_i} \text{Tr}_{R_j} [\tilde{H}_i(s) \tilde{\rho}(u) \rho_{R_i} \rho_{R_j} \tilde{H}_j(u)] \\ &\quad - \text{Tr}_{R_i} \text{Tr}_{R_j} [\tilde{H}_j(u) \tilde{\rho}(u) \rho_{R_i} \rho_{R_j} \tilde{H}_i(s)] \\ &\quad + \text{Tr}_{R_i} \text{Tr}_{R_j} [\tilde{\rho}(u) \rho_{R_i} \rho_{R_j} \tilde{H}_j(u) \tilde{H}_i(s)]. \end{aligned}$$

Se $i \neq j$ então

$$\begin{aligned} \text{Tr}_R [\tilde{H}_i(s), [\tilde{H}_j(u), \tilde{\rho}_{SR}(u)]] &= \text{Tr}_{R_i} [\tilde{H}_i(s) \rho_{R_i}] \text{Tr}_{R_j} [\tilde{H}_j(u) \rho_{R_j}] \tilde{\rho}(u) \\ &\quad - \text{Tr}_{R_i} [\tilde{H}_i(s) \rho_{R_i}] \tilde{\rho}(u) \text{Tr}_{R_j} [\tilde{H}_j(u) \rho_{R_j}] \\ &\quad - \text{Tr}_{R_j} [\tilde{H}_j(u) \rho_{R_j}] \tilde{\rho}(u) \text{Tr}_{R_i} [\tilde{H}_i(s) \rho_{R_i}] \\ &\quad + \tilde{\rho}(u) \text{Tr}_{R_j} [\tilde{H}_j(u) \rho_{R_j}] \text{Tr}_{R_i} [\tilde{H}_i(s) \rho_{R_i}]. \end{aligned}$$

Como $\text{Tr}_{R_j} \left(\hat{b}_{k,j} \rho_{R_j} \right) = \text{Tr}_{R_j} \left(\hat{b}_{k,j}^\dagger \rho_{R_j} \right) = 0$ tem-se que :

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{R_j} \left(\tilde{H}_j(u) \rho_{R_j} \right) &= \tilde{A}_j(u) \sum_k (g_{k,j} \text{Tr}_{R_j} \left(\hat{b}_{k,j} \rho_{R_j} \right) e^{-i\omega_k u} + g_{k,j}^* \text{Tr}_{R_j} \left(\hat{b}_{k,j}^\dagger \rho_{R_j} \right) e^{i\omega_k u}) \\ &= 0, \end{aligned}$$

logo

$$\text{Tr}_R \left[\tilde{H}_i(s), \left[\tilde{H}_j(u), \tilde{\rho}_{SR}(u) \right] \right] = 0.$$

Portanto, apenas os termos com $i = j$ contribuem para a equação (B.53):

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}(0) - \sum_j g_j^2 \int_0^t ds \int_0^s du \text{Tr}_R \left[\tilde{H}_j(s), \left[\tilde{H}_j(u), \tilde{\rho}_S(u) \otimes \rho_{R_j} \right] \right] \quad (\text{B.53})$$

Aplicando a dedução da equação mestra para cada um destes termos chegamos ao seguinte resultado:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho(t) &= -i \left[\hat{H}_S + \sum_j \hat{H}_{LS}^j, \rho(t) \right] \quad (\text{B.54}) \\ &+ \sum_j \gamma_j(0) \left[\hat{A}_j(0) \rho(t) \hat{A}_j^\dagger(0) - \frac{1}{2} \left\{ \hat{A}_j^\dagger(0) \hat{A}_j(0), \rho(t) \right\} \right] \\ &+ 2\pi \sum_j \sum_{\omega > 0} f_j(\omega) [1 + N_j(\omega)] \left[\hat{A}_j(\omega) \rho(t) \hat{A}_j^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ \hat{A}_j^\dagger(\omega) \hat{A}_j(\omega), \rho(t) \right\} \right] \\ &+ 2\pi \sum_j \sum_{\omega > 0} f_j(\omega) N_j(\omega) \left[\hat{A}_j^\dagger(\omega) \rho(t) \hat{A}_j(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ \hat{A}_j(\omega) \hat{A}_j^\dagger(\omega), \rho(t) \right\} \right]. \end{aligned}$$

B.6 Representação Matricial da Equação Mestra

A equação mestra (B.54) pode ser escrita na forma:

$$\frac{d}{dt} \rho_v(t) = \mathcal{L}_t \rho_v(t), \quad (\text{B.55})$$

onde \mathcal{L}_t é uma matriz de dimensão $N^2 \times N^2$ (onde N é a dimensão do espaço de Hilbert do sistema) e $\rho_v(t)$ um vetor de dimensão N . Esta matriz é construída a partir da base formada pelos autoestados $|i\rangle$ ($i = 1, \dots, N$) do Hamiltoniano \hat{H}_S . Por exemplo, considere o caso em que \hat{H}_S descreve um sistema de dois

níveis, cuja base é $\{|1\rangle, |2\rangle\}$. Neste caso, a dinâmica da equação mestra (B.54) é caracterizada por um sistema de quatro equações diferenciais acopladas

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_{1,2}(t) &= L_{1,1}\rho_{1,2} + L_{1,2}\rho_{2,1} + L_{1,3}\rho_{1,1} + L_{1,4}\rho_{2,2}, \\ \dot{\rho}_{2,1}(t) &= L_{2,1}\rho_{1,2} + L_{2,2}\rho_{2,1} + L_{2,3}\rho_{1,1} + L_{2,4}\rho_{2,2}, \\ \dot{\rho}_{1,1}(t) &= L_{3,1}\rho_{1,2} + L_{3,2}\rho_{2,1} + L_{3,3}\rho_{1,1} + L_{3,4}\rho_{2,2}, \\ \dot{\rho}_{2,2}(t) &= L_{4,1}\rho_{1,2} + L_{4,2}\rho_{2,1} + L_{4,3}\rho_{1,1} + L_{4,4}\rho_{2,2},\end{aligned}$$

com $\rho_{i,j} = \langle i|\rho(t)|j\rangle$. Este sistema pode ser representado através da equação vetorial:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \rho_{1,2} \\ \rho_{2,1} \\ \rho_{1,1} \\ \rho_{2,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{1,1} & L_{1,2} & L_{1,3} & L_{1,4} \\ L_{2,1} & L_{2,2} & L_{2,3} & L_{2,4} \\ L_{3,1} & L_{3,2} & L_{3,3} & L_{3,4} \\ L_{4,1} & L_{4,2} & L_{4,3} & L_{4,4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{1,2} \\ \rho_{2,1} \\ \rho_{1,1} \\ \rho_{2,2} \end{pmatrix},$$

que corresponde a equação (B.55) se adotarmos a notação:

$$\rho_v(t) \equiv \begin{pmatrix} \rho_{1,2} \\ \rho_{2,1} \\ \rho_{1,1} \\ \rho_{2,2} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathcal{L}_t \equiv \begin{pmatrix} L_{1,1} & L_{1,2} & L_{1,3} & L_{1,4} \\ L_{2,1} & L_{2,2} & L_{2,3} & L_{2,4} \\ L_{3,1} & L_{3,2} & L_{3,3} & L_{3,4} \\ L_{4,1} & L_{4,2} & L_{4,3} & L_{4,4} \end{pmatrix}_{4 \times 4}.$$

Este resultado pode ser generalizado no caso de uma base com N componentes, $\{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |N\rangle\}$, usando a seguinte representação vetorial do operador densidade ρ :

$$\rho_v(t) \equiv \begin{pmatrix} V \\ V^\dagger \\ \rho_{1,1} \\ \rho_{2,2} \\ \vdots \\ \rho_{N,N} \end{pmatrix},$$

com

$$\begin{aligned}V &= (\rho_{1,2}, \rho_{1,3}, \dots, \rho_{1,N}, \rho_{2,3}, \dots, \rho_{2,N}, \dots, \rho_{N-1,N})^T \\ V^\dagger &= (\rho_{2,1}, \rho_{3,1}, \dots, \rho_{N,1}, \rho_{3,2}, \dots, \rho_{N,2}, \dots, \rho_{N,N-1})^T\end{aligned}$$

onde T indica a operação de transposição. Note que os primeiros componentes do vetor $\rho_v(t)$ estão associados às coerências do operador densidade enquanto que os N últimos elementos estão associados as populações. Este ordenamento foi adotado tendo em vista os problemas tratados no Capítulo 6, pois, para tais problemas, esta ordenação nos permite obter uma representação da matriz \mathcal{L}_t na forma de bloco-diagonal.

B.7 Representação de Kraus

Como discutido anteriormente, a dinâmica de um sistema aberto é obtida ao considerarmos o sistema global $S+R$ como sendo isolado. Portanto, a dinâmica do operador densidade do estado global $\rho_{SR}(t)$ é determinada através da equação:

$$\rho_{SR}(t) = \mathcal{U}(t)\rho_{SR}(0)\mathcal{U}^\dagger(t), \quad (\text{B.56})$$

com $\mathcal{U}(t) = e^{-i\hat{H}t}$ onde \hat{H} é dado pela equação (B.1). Logo, a dinâmica do sistema S é obtida da seguinte maneira:

$$\rho(t) = \text{Tr}_R(\mathcal{U}(t)\rho_{SR}(0)\mathcal{U}^\dagger(t)). \quad (\text{B.57})$$

A dinâmica do operador densidade $\rho(t)$ admite uma *representação de Kraus* [13] se for possível escrever a equação anterior na forma:

$$\rho(t) = \sum_{\alpha} \mathcal{K}_{\alpha}(t)\rho_{SR}(0)\mathcal{K}_{\alpha}^\dagger(t), \quad (\text{B.58})$$

onde os operadores $\mathcal{K}_{\alpha}(t)$, denominados operadores de Kraus, satisfazem a relação:

$$\sum_{\alpha} \mathcal{K}_{\alpha}^\dagger(t)\mathcal{K}_{\alpha}(t) = \mathbf{1}. \quad (\text{B.59})$$

Sempre que o estado inicial do sistema global $S+R$ for descorrelacionado, $\rho_{SR}(0) = \rho(0) \otimes \rho_R(0)$, é possível obter tal representação. Para demonstrar este fato, vamos escrever o estado inicial do reservatório em termos de uma base ortonormal do reservatório $\{|r_i\rangle\}$:

$$\rho_R(0) = \sum_i p_i |r_i\rangle \langle r_i|, \quad (\text{B.60})$$

com $0 \leq p_i \leq 1$ e $\sum_i p_i = 1$. Substituindo a equação (B.60) na equação (B.57) e usando a hipótese $\rho_{SR}(0) = \rho(0) \otimes \rho_R(0)$:

$$\begin{aligned} \rho(t) &= \text{Tr}_R \left(\mathcal{U}(t) \rho(0) \otimes \sum_i p_i |r_i\rangle \langle r_i| \mathcal{U}^\dagger(t) \right) \\ &= \sum_{i,j} \langle r_j| (\mathcal{U}(t) \rho(0) \otimes p_i |r_i\rangle \langle r_i| \mathcal{U}^\dagger(t)) |r_j\rangle \\ &= \sum_{i,j} p_i \langle r_j| \mathcal{U}(t) |r_i\rangle \rho(0) \langle r_i| \mathcal{U}^\dagger(t) |r_j\rangle, \end{aligned}$$

portanto

$$\rho(t) = \sum_{i,j} \mathcal{K}_{i,j}(t) \rho(0) \mathcal{K}_{i,j}^\dagger(t), \quad (\text{B.61})$$

onde

$$\mathcal{K}_{i,j}(t) = \sqrt{p_i} \langle r_j| \mathcal{U}(t) |r_i\rangle. \quad (\text{B.62})$$

No capítulo 3, investigamos a dinâmica de dois sistemas não-interagentes (dois qubits) sujeitos a ação de reservatórios térmicos independentes. Neste caso, o Hamiltoniano do sistema global, formado pelos dois sistemas e seus respectivos reservatórios, pode ser escrito como:

$$\hat{H} = \hat{H}_{S_1} + \hat{H}_{S_2} + \hat{H}_{R_1} + \hat{H}_{R_2} + \hat{H}_{SR_1} + \hat{H}_{SR_2}, \quad (\text{B.63})$$

onde \hat{H}_{S_i} e \hat{H}_{R_i} denotam os Hamiltonianos do sistema i e do reservatório i , respectivamente. O operador de evolução associado a este Hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{U}(t) = e^{-i\hat{H}t} = e^{-i\hat{H}_1 t} e^{-i\hat{H}_2 t} = \mathcal{U}_1(t) \mathcal{U}_2(t),$$

com $\hat{H}_i = \hat{H}_{S_i} + \hat{H}_{R_i} + \hat{H}_{SR_i}$. Logo, o operador densidade do sistema obtida através da equação (B.57) e assumindo um estado inicial descorrelacionado, $\rho_{SR}(0) = \rho(0) \otimes \rho_{R_1}(0) \otimes \rho_{R_2}(0)$, é dado pela seguinte expressão:

$$\rho(t) = \text{Tr}_{R_1} \text{Tr}_{R_2} \left(\mathcal{U}_1(t) \mathcal{U}_2(t) \rho(0) \otimes \rho_{R_1}(0) \otimes \rho_{R_2}(0) \mathcal{U}_1^\dagger(t) \mathcal{U}_2^\dagger(t) \right), \quad (\text{B.64})$$

onde $\rho(t)$ é o operador densidade do sistema $S_1 + S_2$. Adotando a mesma abordagem empregada acima, vamos considerar que os estados iniciais dos reservatórios podem ser escritos como:

$$\rho_{R_1}(0) = \sum_i p_i^1 |r_i^1\rangle \langle r_i^1| \quad \text{e} \quad \rho_{R_2}(0) = \sum_i p_i^2 |r_i^2\rangle \langle r_i^2|,$$

onde $\{|r_i^k\rangle\}$ é uma base ortonormal do k -ésimo reservatório. Com isso, o operador densidade $\rho(t)$ assume a forma:

$$\begin{aligned}\rho(t) &= \text{Tr}_{R_1} \text{Tr}_{R_2} \left(\mathcal{U}_1(t) \mathcal{U}_2(t) \rho(0) \rho_{R_1}(0) \rho_{R_2}(0) \mathcal{U}_1^\dagger(t) \mathcal{U}_2^\dagger(t) \right) \\ &= \sum_{i,j} p_i^1 p_j^2 \text{Tr}_{R_1} \text{Tr}_{R_2} \left(\mathcal{U}_1(t) \mathcal{U}_2(t) \rho(0) |r_i^1\rangle \langle r_i^1| |r_j^2\rangle \langle r_j^2| \mathcal{U}_1^\dagger(t) \mathcal{U}_2^\dagger(t) \right) \\ &= \sum_{i,j,m,n} p_i^1 p_j^2 \langle r_n^1 | \langle r_m^2 | \left(\mathcal{U}_1(t) \mathcal{U}_2(t) \rho(0) |r_i^1\rangle \langle r_i^1| |r_j^2\rangle \langle r_j^2| \mathcal{U}_1^\dagger(t) \mathcal{U}_2^\dagger(t) \right) |r_n^1\rangle |r_m^2\rangle \\ &= \sum_{i,j,m,n} p_i^1 p_j^2 \langle r_n^1 | \mathcal{U}_1(t) |r_i^1\rangle \langle r_m^2 | \mathcal{U}_2(t) |r_j^2\rangle \rho(0) \langle r_i^1 | \mathcal{U}_1^\dagger(t) |r_n^1\rangle \langle r_j^2 | \mathcal{U}_2^\dagger(t) |r_m^2\rangle\end{aligned}$$

logo,

$$\rho(t) = \sum_{i,j,m,n} \mathcal{K}_{i,n}^1(t) \mathcal{K}_{j,m}^2(t) \rho(0) \mathcal{K}_{i,n}^{1\dagger}(t) \mathcal{K}_{j,m}^{2\dagger}(t), \quad (\text{B.65})$$

onde

$$\mathcal{K}_{i,n}^k(t) = \sqrt{p_i} \langle r_n^k | \mathcal{U}(t) |r_i^k\rangle, \quad (\text{B.66})$$

são os operadores de Kraus atuando no k -ésimo sistema.

Como estamos considerando a inexistência de interação entre os dois qubits, é possível relacionar a dinâmica do sistema composto com a dinâmica individual de cada qubit. Introduzindo a identidade $\mathbf{1} = |0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1|$ entre os operadores de Kraus e o operador densidade da equação (B.61), a dinâmica do operador densidade do k -ésimo qubit pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}\rho^k(t) &= \sum_{l,l'=0,1} \sum_{i,j} \mathcal{K}_{i,j}(t) |l\rangle \langle l| \rho^k(0) |l'\rangle \langle l'| \mathcal{K}_{i,j}^\dagger(t) \\ &= \sum_{l,l'=0,1} \sum_{i,j} \mathcal{K}_{i,j}(t) |l\rangle \langle l'| \mathcal{K}_{i,j}^\dagger(t) \rho_{l,l'}^k(0),\end{aligned}$$

portanto,

$$\rho_{p,p'}^k(t) = \sum_{l,l'=0,1} \mathcal{M}_{pp',ll'}^k(t) \rho_{l,l'}^k(0), \quad (\text{B.67})$$

onde

$$\mathcal{M}_{pp',ll'}^k(t) = \sum_{i,j} \langle p | \mathcal{K}_{i,j}(t) |l\rangle \langle l'| \mathcal{K}_{i,j}^\dagger(t) |p'\rangle. \quad (\text{B.68})$$

Aplicando o mesmo procedimento na equação (B.65), ou seja, introduzindo a identidade

$$\mathbf{1} = |00\rangle \langle 00| + |01\rangle \langle 01| + |10\rangle \langle 10| + |11\rangle \langle 11|$$

entre os operadores de Kraus e o operador densidade, obtém-se o seguinte resultado:

$$\rho_{pp',qq'}(t) = \sum_{l,l',r,r'=0,1} \mathcal{M}_{pq,ll'}^1(t) \mathcal{M}_{p'q',rr'}^2(t) \rho_{lr,l'r'}(0), \quad (\text{B.69})$$

que associa a dinâmica do sistema composto com a dinâmica individual de cada qubit, determinada pela equação (B.67).

Referências Bibliográficas

- [1] BELL, J. S. On the Einstein-Podolsky-Rosen Paradox. *Physics*, v. 1, n. 3, p. 195–200, 1964.
- [2] EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete? *Physical Review*, New York, v. 47, n. 10, p. 777–780, May 1935.
- [3] WERNER, R. Quantum states with Einstein-Podolsky-Rosen correlations admitting a hidden-variable model. *Physical Review A*, Woodbury, v. 40, n. 8, p. 4277–4281, Oct. 1989.
- [4] OLLIVIER, H.; ZUREK, W. H. Quantum Discord: A Measure of the Quantumness of Correlations. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 88, p. 017901, Dec. 2001.
- [5] MERALI, Z. Quantum computing: The power of discord. *Nature*, London, v. 474, n. 7349, p. 24–6, June 2011.
- [6] LANYON, B. P.; BARBIERI, M.; ALMEIDA, M. P.; WHITE, A. G. Experimental Quantum Computing without Entanglement. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 101, n. 20, p. 200501, Nov. 2008.
- [7] DATTA, A.; VIDAL, G. Role of entanglement and correlations in mixed-state quantum computation. *Physical Review A*, Woodbury, v. 75, n. 4, p. 042310, Apr. 2007.
- [8] DATTA, A.; SHAJI, A.; CAVES, C. M. Quantum Discord and the Power of One Qubit. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 100, n. 5, p. 050502, Feb. 2008.
- [9] PASSANTE, G.; MOUSSA, O.; TROTTIER, D.; LAFLAMME, R. Experimental detection of nonclassical correlations in mixed-state quantum computation. *Physical Review A*, Woodbury, v. 84, n. 4, p. 044302, Oct. 2011.
- [10] PASSANTE, G.; MOUSSA, O.; LAFLAMME, R. Measuring geometric quantum discord using one bit of quantum information. *Physical Review A*, Woodbury, v. 85, n. 3, p. 032325, Mar. 2012.
- [11] KNILL, E.; LAFLAMME, R. Power of One Bit of Quantum Information. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 81, n. 25, p. 5672–5675, Dec. 1998.

- [12] NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. *Quantum computation and quantum information*. United Kingdom: Cambridge University Press, 2004.
- [13] BREUER, H.-P.; PETRUCCIONE, F. *The theory of open quantum systems*. New York: Oxford University Press, 2007.
- [14] YU, T.; EBERLY, J. H. Finite-Time Disentanglement Via Spontaneous Emission. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 93, n. 14, p. 140404, Sept. 2004.
- [15] DODD, P.; HALLIWELL, J. Disentanglement and decoherence by open system dynamics. *Physical Review A*, Woodbury, v. 69, n. 5, p. 052105, May 2004.
- [16] YU, T.; EBERLY, J. H. Quantum Open System Theory: Bipartite Aspects. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 97, n. 14, p. 140403, Oct. 2006.
- [17] SANTOS, M.; MILMAN, P.; DAVIDOVICH, L.; ZAGURY, N. Direct measurement of finite-time disentanglement induced by a reservoir. *Physical Review A*, Woodbury, v. 73, n. 4, p. 040305, Apr. 2006.
- [18] ALMEIDA, M. P.; DE MELO, F.; HOR-MEYLL, M.; SALLES, A.; WALBORN, S. P.; RIBEIRO, P. H. S.; DAVIDOVICH, L. Environment-induced sudden death of entanglement. *Science (New York, N.Y.)*, v. 316, n. 5824, p. 579–82, Apr. 2007.
- [19] AOLITA, L.; CHAVES, R.; CAVALCANTI, D.; ACÍN, A.; DAVIDOVICH, L. Scaling Laws for the Decay of Multiqubit Entanglement. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 100, n. 8, p. 080501, Feb. 2008.
- [20] SHABANI, A.; LIDAR, D. A. Vanishing Quantum Discord is Necessary and Sufficient for Completely Positive Maps. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 102, n. 10, p. 100402, Mar. 2009.
- [21] WERLANG, T.; SOUZA, S.; FANCHINI, F. F.; Villas Boas, C. J. Robustness of quantum discord to sudden death. *Physical Review A*, Woodbury, v. 80, n. 2, p. 024103, Aug. 2009.
- [22] PRESKILL, J. Quantum information and physics: Some future directions. *Journal of Modern Optics*, v. 47, n. 2-3, p. 127–137, Feb. 2000.
- [23] OSBORNE, T. J.; NIELSEN, M. A. Entanglement, Quantum Phase Transitions, and Density Matrix Renormalization. *Quantum Information Processing*, v. 1, n. April, p. 45–53, 2002.
- [24] OSBORNE, T.; NIELSEN, M. Entanglement in a simple quantum phase transition. *Physical Review A*, Woodbury, v. 66, n. 3, p. 032110, Sept. 2002.
- [25] OSTERLOH, A.; AMICO, L.; FALCI, G.; FAZIO, R. Scaling of entanglement close to a quantum phase transition. *Nature*, London, v. 416, n. 6881, p. 608–10, Apr. 2002.

- [26] DILLENCHNEIDER, R. Quantum discord and quantum phase transition in spin chains. *Physical Review B*, v. 78, n. 22, p. 224413, Dec. 2008.
- [27] CALLEN, H. B. *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics*. New Jersey: Wiley, 1985.
- [28] RIGOL, M.; DUNJKO, V.; OLSHANII, M. Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems. *Nature*, London, v. 452, n. 7189, p. 854–8, Apr. 2008.
- [29] RIGOL, M. Breakdown of Thermalization in Finite One-Dimensional Systems. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 103, n. September, p. 100403, Sept. 2009.
- [30] GENWAY, S.; HO, A.; LEE, D. Dynamics of Thermalization in Small Hubbard-Model Systems. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 105, n. 26, p. 260402, Dec. 2010.
- [31] PONOMAREV, A.; DENISOV, S.; HÄNGGI, P. Thermal Equilibration between Two Quantum Systems. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 106, n. 1, p. 010405, Jan. 2011.
- [32] BUNIN, G.; D’ALESSIO, L.; KAFRI, Y.; POLKOVNIKOV, A. Universal energy fluctuations in thermally isolated driven systems. *Nature Physics*, v. 7, n. 11, p. 913–917, Aug. 2011.
- [33] BANULS, M.; CIRAC, J.; HASTINGS, M. Strong and Weak Thermalization of Infinite Nonintegrable Quantum Systems. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 106, n. 5, p. 050405, Feb. 2011.
- [34] GOGOLIN, C.; MÜLLER, M.; EISERT, J. Absence of Thermalization in Nonintegrable Systems. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 106, n. 4, p. 040401, Jan. 2011.
- [35] RIERA, A.; GOGOLIN, C.; EISERT, J. Thermalization in Nature and on a Quantum Computer. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 108, n. 8, p. 080402, Feb. 2012.
- [36] KHINCHIN, A. I. *Mathematical foundations of statistical mechanics*. New York: Dover Publications, 1949.
- [37] TOLMAN, R. C.; PHYSICS. *The principles of statistical mechanics*. New York: Dover Publications, 1979.
- [38] SCHRÖDINGER, E.; BORN, M. Discussion of Probability Relations between Separated Systems. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, v. 31, n. 04, p. 555, Oct. 2008.
- [39] RIGOLIN, G. G. *Estados quânticos emaranhados*. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Estadual de Campinas - Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas.

- [40] ASPECT, A.; GRANGIER, P.; ROGER, G. Experimental Tests of Realistic Local Theories via Bell's Theorem. *Physical Review Letters*, New York, v. 47, n. 7, p. 460–463, Aug. 1981.
- [41] ASPECT, A.; GRANGIER, P.; ROGER, G. Experimental Realization of Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm Gedankenexperiment: A New Violation of Bell's Inequalities. *Physical Review Letters*, New York, v. 49, n. 2, p. 91–94, July 1982.
- [42] GERHARDT, I.; LIU, Q.; LAMAS-LINARES, A.; SKAAR, J.; SCARANI, V.; MAKAROV, V.; KURTSIEFER, C. Experimentally Faking the Violation of Bell Inequalities. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 107, n. 17, p. 170404, Oct. 2011.
- [43] ASPECT, A. Bell's inequality test : more ideal than ever. *Nature*, London, v. 398, n. March, p. 189–190, 1999.
- [44] ROWE, M. A.; KIELPINSKI, D.; MEYER, V.; SACKETT, C. A.; ITANO, W. M.; MONROE, C.; WINELAND, D. J. Experimental violation of a Bell's inequality with efficient detection. *Nature*, London, v. 409, n. 6822, p. 791–4, Feb. 2001.
- [45] MATSUKEVICH, D.; MAUNZ, P.; MOEHRING, D.; OLMSCHENK, S.; MONROE, C. Bell Inequality Violation with Two Remote Atomic Qubits. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 100, n. 15, p. 150404, Apr. 2008.
- [46] HORODECKI, R.; HORODECKI, M.; HORODECKI, K. Quantum entanglement. *Reviews of Modern Physics*, Woodbury, v. 81, n. 2, p. 865–942, June 2009.
- [47] BENNETT, C.; WIESNER, S. Communication via one- and two-particle operators on Einstein-Podolsky-Rosen states. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 69, n. 20, p. 2881–2884, Nov. 1992.
- [48] 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*, Woodbury, v. 70, n. 13, p. 1895–1899, Mar. 1993.
- [49] PERES, A. Separability Criterion for Density Matrices. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 77, n. 8, p. 1413–1415, Aug. 1996.
- [50] HORODECKI, M.; HORODECKI, P.; HORODECKI, R. Separability of mixed states: necessary and sufficient conditions. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 223, n. 1-2, p. 1–8, Nov. 1996.
- [51] SIMON, R. Peres-horodecki separability criterion for continuous variable systems. *Physical review letters*, v. 84, n. 12, p. 2726–9, Mar. 2000.
- [52] BENNETT, C.; BERNSTEIN, H.; POPESCU, S.; SCHUMACHER, B. Concentrating partial entanglement by local operations. *Physical review. A*, v. 53, n. 4, p. 2046–2052, Apr. 1996.

- [53] BENNETT, C.; DIVINCENZO, D.; SMOLIN, J.; WOOTTERS, W. Mixed-state entanglement and quantum error correction. *Physical review A*, v. 54, n. 5, p. 3824–3851, Nov. 1996.
- [54] WOOTTERS, W. K. Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 80, n. 10, p. 2245–2248, 1998.
- [55] HENDERSON, L.; VEDRAL, V.; SEARCH, H.; JOURNALS, C.; CONTACT, A.; IOPSCIENCE, M.; ADDRESS, I. P. Classical, quantum and total correlations. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 34, n. 35, p. 6899–6905, Sept. 2001.
- [56] JOZSA, R.; LINDEN, N. On the role of entanglement in quantum-computational speed-up. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, v. 459, n. 2036, p. 2011–2032, Aug. 2003.
- [57] DATTA, A.; SHAJI, A. Quantum Discord and Quantum Computing - an Appraisal. *International Journal of Quantum Information*, v. 09, n. 07n08, p. 1787, 2011.
- [58] MODI, K.; PATEREK, T.; SON, W.; VEDRAL, V.; WILLIAMSON, M. Unified View of Quantum and Classical Correlations. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 104, n. 8, p. 080501, Feb. 2010.
- [59] DAKIĆ, B.; VEDRAL, V.; BRUKNER, V. Necessary and Sufficient Condition for Nonzero Quantum Discord. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 105, n. 19, p. 190502, Nov. 2010.
- [60] MYERS, J. M. Conditional Probabilities and Density Operators in Quantum Modeling. *Foundations of Physics*, v. 36, n. 7, p. 1012–1035, Apr. 2006.
- [61] MODI, K.; BRODUTCH, A.; CABLE, H.; PATEREK, T.; VEDRAL, V. The classical-quantum boundary for correlations: Discord and related measures. *Reviews of Modern Physics*, Woodbury, v. 84, n. 4, p. 1655–1707, Nov. 2012.
- [62] ZUREK, W. H. Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical. *Reviews of Modern Physics*, Woodbury, v. 75, n. 3, p. 715–775, May 2003.
- [63] ZUREK, W. Pointer basis of quantum apparatus: Into what mixture does the wave packet collapse? *Physical Review D*, v. 24, n. 6, p. 1516–1525, Sept. 1981.
- [64] D’ARIANO, G. M.; PRESTI, P. L.; PERINOTTI, P. Classical randomness in quantum measurements. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 38, n. 26, p. 5979–5991, July 2005.
- [65] ROCKAFELLAR, R. T. *Convex analysis*. New Jersey: Princeton University Press, 1996.

- [66] GALVE, F.; GIORGI, G. L.; ZAMBRINI, R. Orthogonal measurements are almost sufficient for quantum discord of two qubits. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 96, n. 4, p. 40005, Nov. 2011.
- [67] CHEN, Q.; ZHANG, C.; YU, S.; YI, X.; OH, C. Quantum discord of two-qubit X states. *Physical Review A*, Woodbury, v. 84, n. 4, p. 042313, Oct. 2011.
- [68] MARINESCU, D. C. *Classical and quantum information*. Amsterdam: Academic Press, 2011.
- [69] HAYDEN, P.; JOZSA, R.; PETZ, D.; WINTER, A. Structure of States Which Satisfy Strong Subadditivity of Quantum Entropy with Equality. *Communications in Mathematical Physics*, v. 246, n. 2, p. 359–374, Apr. 2004.
- [70] DATTA, A. A Condition for the Nullity of Quantum Discord. *ArXiv*, v. 1003.5256, Mar. 2010.
- [71] LI, G.-X.; YI, Z.; FICEK, Z. Nullity of quantum discord of two-qubit X-state systems. *ArXiv*, v. 1101.4983, Jan. 2011.
- [72] LUO, S. Quantum discord for two-qubit systems. *Physical Review A*, Woodbury, v. 77, n. 4, p. 042303, Apr. 2008.
- [73] DAJKA, J.; MIERZEJEWSKI, M.; LUCZKA, J. Non-Markovian entanglement evolution of two uncoupled qubits. *Physical Review A*, Woodbury, v. 77, n. 4, p. 042316, Apr. 2008.
- [74] ÁNGEL RIVAS; HUELGA, S. F. *Open quantum systems: An introduction*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2011.
- [75] BELLOMO, B.; Lo Franco, R.; COMPAGNO, G. Non-Markovian Effects on the Dynamics of Entanglement. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 99, n. 16, p. 160502, Oct. 2007.
- [76] LÓPEZ, C.; ROMERO, G.; LASTRA, F.; SOLANO, E.; RETAMAL, J. Sudden Birth versus Sudden Death of Entanglement in Multipartite Systems. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 101, n. 8, p. 080503, Aug. 2008.
- [77] FICEK, Z.; TANÁŠ, R. Delayed sudden birth of entanglement. *Physical Review A*, Woodbury, v. 77, n. 5, p. 054301, May 2008.
- [78] MAZZOLA, L.; MANISCALCO, S.; PILO, J.; SUOMINEN, K.-A.; GARRAWAY, B. Sudden death and sudden birth of entanglement in common structured reservoirs. *Physical Review A*, Woodbury, v. 79, n. 4, p. 042302, Apr. 2009.
- [79] GARRAWAY, B.; KNIGHT, P. Cavity modified quantum beats. *Physical review. A*, v. 54, n. 4, p. 3592–3602, Oct. 1996.

- [80] GARRAWAY, B. M. Nonperturbative decay of an atomic system in a cavity. *Physical Review A*, Woodbury, v. 55, n. 3, p. 2290–2303, Mar. 1997.
- [81] DALTON, B.; GARRAWAY, B. Non-Markovian decay of a three-level cascade atom in a structured reservoir. *Physical Review A*, Woodbury, v. 68, n. 3, p. 033809, Sept. 2003.
- [82] MAZIERO, J.; CÉLERI, L. C.; SERRA, R. M.; VEDRAL, V. Classical and quantum correlations under decoherence. *Physical Review A*, Woodbury, v. 80, n. 4, p. 044102, Oct. 2009.
- [83] AUCCAISE, R.; CÉLERI, L.; SOARES-PINTO, D.; DEAZEVEDO, E.; MAZIERO, J.; SOUZA, A.; BONAGAMBA, T.; SARTHOUR, R.; OLIVEIRA, I.; SERRA, R. Environment-Induced Sudden Transition in Quantum Discord Dynamics. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 107, n. 14, p. 20–24, Sept. 2011.
- [84] FERRARO, A.; AOLITA, L.; CAVALCANTI, D.; CUCCHIETTI, F. M.; ACÍN, A. Almost all quantum states have nonclassical correlations. *Physical Review A*, Woodbury, v. 81, n. 5, p. 052318, May 2010.
- [85] YEOMANS, J. M. *Statistical mechanics of phase transitions*. New York: Oxford University Press, 1992.
- [86] ESSLER, F. H. L.; FRAHM, H.; GÖHMANN, F.; KLÜMPER, A.; KOREPIN, V. E. *The one-dimensional hubbard model*. United Kingdom: Cambridge University Press, 2010.
- [87] MATTIS, D. C. *The theory of magnetism made simple: An introduction to physical concepts and to some useful mathematical methods*. New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2006.
- [88] DE OLIVEIRA, T. R. *Emaranhamento e estados de produto de matrizes em transições de fase quânticas*. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Estadual de Campinas - Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas.
- [89] SACHDEV, S. *Quantum phase transitions*. United Kingdom: Cambridge University Press, 2011.
- [90] GOLDENFELD, N. *Lectures on phase transitions and the renormalization group*. Boulder, USA: Westview Press.
- [91] VOJTA, M. Quantum phase transitions. *Reports on Progress in Physics*, v. 66, n. 12, p. 2069–2110, Dec. 2003.
- [92] ARNESEN, M. C.; BOSE, S.; VEDRAL, V. Natural Thermal and Magnetic Entanglement in the 1D Heisenberg Model. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 87, n. 1, p. 017901, June 2001.
- [93] GUNLYCKE, D.; KENDON, V.; VEDRAL, V.; BOSE, S. Thermal concurrence mixing in a one-dimensional Ising model. *Physical Review A*, Woodbury, v. 64, n. 4, p. 042302, Sept. 2001.

- [94] AMICO, L.; OSTERLOH, A.; VEDRAL, V. Entanglement in many-body systems. *Reviews of Modern Physics*, Woodbury, v. 80, n. 2, p. 517–576, May 2008.
- [95] GU, S.-J.; LIN, H.-Q.; LI, Y.-Q. Entanglement, quantum phase transition, and scaling in the XXZ chain. *Physical Review A*, Woodbury, v. 68, n. 4, p. 042330, Oct. 2003.
- [96] GU, S.-J.; TIAN, G.-S.; LIN, H.-Q. Ground-state entanglement in the XXZ model. *Physical Review A*, Woodbury, v. 71, n. 5, p. 052322, May 2005.
- [97] VIDAL, G.; WERNER, R. Computable measure of entanglement. *Physical Review A*, Woodbury, v. 65, n. 3, p. 032314, Feb. 2002.
- [98] WU, L.-A.; SARANDY, M.; LIDAR, D. Quantum Phase Transitions and Bipartite Entanglement. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 93, n. 25, p. 250404, Dec. 2004.
- [99] DE OLIVEIRA, T.; RIGOLIN, G.; DE OLIVEIRA, M.; MIRANDA, E. Multipartite Entanglement Signature of Quantum Phase Transitions. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 97, n. 17, p. 170401, Oct. 2006.
- [100] DE OLIVEIRA, T.; RIGOLIN, G.; DE OLIVEIRA, M. Genuine multipartite entanglement in quantum phase transitions. *Physical Review A*, Woodbury, v. 73, n. 1, p. 010305, Jan. 2006.
- [101] DE OLIVEIRA, T.; RIGOLIN, G.; DE OLIVEIRA, M.; MIRANDA, E. Symmetry-breaking effects upon bipartite and multipartite entanglement in the XY model. *Physical Review A*, Woodbury, v. 77, n. 3, p. 032325, Mar. 2008.
- [102] WU, L.-A.; SARANDY, M.; LIDAR, D.; SHAM, L. Linking entanglement and quantum phase transitions via density-functional theory. *Physical Review A*, Woodbury, v. 74, n. 5, p. 052335, Nov. 2006.
- [103] TAKAHASHI, M. *Thermodynamics of one-dimensional solvable models*. United Kingdom: Cambridge University Press, 2005.
- [104] YANG, M.-F. Reexamination of entanglement and the quantum phase transition. *Physical Review A*, Woodbury, v. 71, n. 3, p. 030302, Mar. 2005.
- [105] SARANDY, M. S. Classical correlation and quantum discord in critical systems. *Physical Review A*, Woodbury, v. 80, n. 2, p. 1–9, Aug. 2009.
- [106] RING, P.; SCHUCK, P. *The nuclear many-body problem (theoretical and mathematical physics)*. Germany: Springer, 5 2005.
- [107] MAZIERO, J.; GUZMAN, H.; CÉLERI, L.; SARANDY, M.; SERRA, R. Quantum and classical thermal correlations in the XY spin-1/2 chain. *Physical Review A*, Woodbury, v. 82, n. 1, p. 012106, July 2010.

- [108] SUN, Z.-Y.; LI, L.; YAO, K.-L.; DU, G.-H.; LIU, J.-W.; LUO, B.; LI, N.; LI, H.-N. Quantum discord in matrix product systems. *Physical Review A*, Woodbury, v. 82, n. 3, p. 032310, Sept. 2010.
- [109] WILKS, J. *The third law of thermodynamics*. New York: Oxford University Press, 1963.
- [113] RIGOLIN, G. Thermal entanglement in the two-qubit heisenberg xyz model. *International Journal of Quantum Information*, v. 2, n. 3, p. 393–405, 2004.
- [110] Lagmago Kamta, G.; STARACE, A. Anisotropy and Magnetic Field Effects on the Entanglement of a Two Qubit Heisenberg XY Chain. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 88, n. 10, p. 31–34, Feb. 2002.
- [111] WANG, X. Entanglement in the quantum Heisenberg XY model. *Physical Review A*, Woodbury, v. 64, n. 1, p. 012313, June 2001.
- [112] SUN, Y.; CHEN, Y.; CHEN, H. Thermal entanglement in the two-qubit Heisenberg XY model under a nonuniform external magnetic field. *Physical Review A*, Woodbury, v. 68, n. 4, p. 044301, Oct. 2003.
- [114] AMICO, L.; PATANÈ, D. Entanglement crossover close to a quantum critical point. *Europhysics Letters (EPL)*, v. 77, n. 1, p. 17001, Jan. 2007.
- [115] WERLANG, T.; RIGOLIN, G. Thermal and magnetic quantum discord in Heisenberg models. *Physical Review A*, Woodbury, v. 81, n. 4, p. 044101, Apr. 2010.
- [116] WERLANG, T.; TRIPPE, C.; RIBEIRO, G.; RIGOLIN, G. Quantum Correlations in Spin Chains at Finite Temperatures and Quantum Phase Transitions. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 105, n. 9, p. 095702, Aug. 2010.
- [117] WERLANG, T.; RIBEIRO, G.; RIGOLIN, G. Spotlighting quantum critical points via quantum correlations at finite temperatures. *Physical Review A*, Woodbury, v. 83, n. 6, p. 062334, June 2011.
- [118] WERLANG, T.; RIBEIRO, G. A. P.; RIGOLIN, G. Interplay between quantum phase transitions and the behavior of quantum correlations at finite temperatures. *International Journal of Modern Physics B*, v. 27, n. 01n03, p. 1345032, Jan. 2013.
- [119] RONG, X.; WANG, Z.; JIN, F.; GENG, J.; FENG, P.; XU, N.; WANG, Y.; JU, C.; SHI, M.; DU, J. Quantum Discord for Investigating Quantum Correlations without Entanglement in Solids. *arXiv*, v. 1005.4776v1, Mar. 2012.
- [120] SYLJUASEN, O. Entanglement and spontaneous symmetry breaking in quantum spin models. *Physical Review A*, Woodbury, v. 68, n. 6, p. 060301, Dec. 2003.

- [121] TOMASELLO, B.; ROSSINI, D.; HAMMA, A.; AMICO, L. Ground-state factorization and correlations with broken symmetry. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 96, n. 2, p. 27002, Oct. 2011.
- [122] SARANDY, M. S. Classical correlation and quantum discord in critical systems. *Physical Review A*, Woodbury, v. 80, n. 2, p. 022108, Aug. 2009.
- [123] BORTZ, M.; GÖHMANN, F. Exact thermodynamic limit of short-range correlation functions of the antiferromagnetic XXZ-chain at finite temperatures. *The European Physical Journal B*, Les Ulis, v. 46, n. 3, p. 399–408, Aug. 2005.
- [124] TRIPPE, C.; GÖHMANN, F.; KLÜMPER, A. Short-distance thermal correlations in the massive XXZ chain. *The European Physical Journal B*, Les Ulis, v. 73, n. 2, p. 253–264, Dec. 2009.
- [125] KLUMPER, A. Thermodynamics of the anisotropic spin-1/2 Heisenberg chain and related quantum chains. *Zeitschrift Physik B: Condensed Matter*, v. 91, n. 4, p. 507–519, Dec. 1993.
- [126] KLUMPER, A. Free energy and correlation lengths of quantum chains related to restricted solid-on-solid lattice models. *Annalen der Physik*, v. 504, n. 7, p. 540–553, Mar. 1992.
- [127] YANG, C. One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin Interactions. III. Applications. *Physical Review*, New York, v. 151, n. 1, p. 258–264, Nov. 1966.
- [128] LIEB, E.; SCHULTZ, T.; MATTIS, D. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. *Annals of Physics*, New York, v. 16, n. 3, p. 407–466, Dec. 1961.
- [129] BAROUCH, E.; MCCOY, B.; DRESDEN, M. Statistical Mechanics of the XY Model. I. *Physical Review A*, New York, v. 2, n. 3, p. 1075–1092, Sept. 1970.
- [130] BAROUCH, E.; MCCOY, B. Statistical Mechanics of the X Y Model. II. Spin-Correlation Functions. *Physical Review A*, New York, v. 3, n. 2, p. 786–804, Feb. 1971.
- [131] ZHONG, M.; TONG, P. The Ising and anisotropy phase transitions of the periodic XY model in a transverse field. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 43, n. 50, p. 505302, Dec. 2010.
- [132] MACKEY, M. C. *Time's arrow: The origins of thermodynamic behavior*. New York: Dover Publications, 2003.
- [133] KRYLOV, N. S. *Works on the foundations of statistical physics*. New Jersey: Princeton University Press, 1979.
- [134] OLIVEIRA, C. R. D.; WERLANG, T. Ergodic hypothesis in classical statistical mechanics. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 29, n. 2, p. 189–201, 2007.

- [135] SIMÁNYI, N. Conditional proof of the Boltzmann-Sinai ergodic hypothesis. *Inventiones mathematicae*, v. 177, n. 2, p. 381–413, Feb. 2009.
- [136] POPESCU, S.; SHORT, A. J.; WINTER, A. Entanglement and the foundations of statistical mechanics. *Nature Physics*, v. 2, n. 11, p. 754–758, Oct. 2006.
- [137] LINDEN, N.; POPESCU, S.; SHORT, A.; WINTER, A. Quantum mechanical evolution towards thermal equilibrium. *Physical Review E*, v. 79, n. 6, p. 1–12, June 2009.
- [138] KINOSHITA, T.; WENGER, T.; WEISS, D. S. A quantum Newton's cradle. *Nature*, London, v. 440, n. 7086, p. 900–3, Apr. 2006.
- [139] BLOCH, I.; ZWERGER, W. Many-body physics with ultracold gases. *Reviews of Modern Physics*, Woodbury, v. 80, n. 3, p. 885–964, July 2008.
- [140] BLATT, R.; WINELAND, D. Entangled states of trapped atomic ions. *Nature*, London, v. 453, n. 7198, p. 1008–15, June 2008.
- [141] MAJER, J.; CHOW, J. M.; GAMBETTA, J. M.; KOCH, J.; JOHNSON, B. R.; SCHREIER, J. A.; FRUNZIO, L.; SCHUSTER, D. I.; HOUCK, A. A.; WALLRAFF, A.; BLAIS, A.; DEVORET, M. H.; GIRVIN, S. M.; SCHOELKOPF, R. J. Coupling superconducting qubits via a cavity bus. *Nature*, London, v. 449, n. 7161, p. 443–7, Sept. 2007.
- [142] GALLAVOTTI, G. *Statistical mechanics: A short treatise*. Germany: Springer, 2010.
- [143] RIGOL, M.; DUNJKO, V.; YUROVSKY, V.; OLSHANII, M. Relaxation in a Completely Integrable Many-Body Quantum System: An Ab Initio Study of the Dynamics of the Highly Excited States of 1D Lattice Hard-Core Bosons. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 98, n. 5, p. 1–4, Feb. 2007.
- [144] RIGOL, M.; SREDNICKI, M. Alternatives to Eigenstate Thermalization. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 108, n. 11, p. 1–5, Mar. 2012.
- [145] DEUTSCH, J. Quantum statistical mechanics in a closed system. *Physical Review A*, Woodbury, v. 43, n. 4, p. 2046–2049, Feb. 1991.
- [146] SREDNICKI, M. Chaos and quantum thermalization. *Physical Review E*, v. 50, n. 2, p. 888–901, Aug. 1994.
- [147] HOROI, M.; ZELEVINSKY, V.; BROWN, B. Chaos vs Thermalization in the Nuclear Shell Model. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 74, n. 26, p. 5194–5197, June 1995.
- [148] IZRAILEV, F. M. Simple models of quantum chaos: Spectrum and eigenfunctions. *Physics Reports*, v. 196, n. 5-6, p. 299–392, Nov. 1990.
- [149] MICHEL, M.; GEMMER, J.; MAHLER, G. Heat conductivity in small quantum systems: Kubo formula in Liouville space. *The European Physical Journal B*, Les Ulis, v. 42, n. 4, p. 555–559, Jan. 2005.

- [150] WU, J.; BERCIU, M. Heat transport in quantum spin chains: Relevance of integrability. *Physical Review B*, v. 83, n. 21, p. 214416, June 2011.
- [151] CARMICHAEL, H. J. *Statistical methods in quantum optics 1: Master equations and fokker-planck equations*. Germany: Springer, 2003.
- [152] LEGGETT, A.; CHAKRAVARTY, S.; DORSEY, A.; FISHER, M.; GARG, A.; ZWERGER, W. Dynamics of the dissipative two-state system. *Reviews of Modern Physics*, Woodbury, v. 59, n. 1, p. 1–85, Jan. 1987.
- [153] WEISS, U. *Quantum dissipative systems*. New Jersey: World Scientific Publishing Company, 2008.
- [154] ZHENG, S.; GUO, G. Efficient scheme for two-atom entanglement and quantum information processing in cavity QED. *Physical review letters*, v. 85, n. 11, p. 2392–5, Sept. 2000.
- [155] COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. *Quantum mechanics*. New Jersey: Wiley-Interscience, 2006. v. 1.
- [156] CHICONE, C. *Ordinary differential equations with applications*. Germany: Springer, 1999.
- [157] ALBASH, T.; BOIXO, S.; LIDAR, D. A.; ZANARDI, P. Quantum Adiabatic Markovian Master Equations. *ArXiv*, v. 1206.4197, June 2012.