

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS**

Rafael Bruno Barbosa Lima

**Controle da não Markovianidade em sistemas quânticos
abertos**

São Carlos

2020

Rafael Bruno Barbosa Lima

**Controle da não Markovianidade em sistemas quânticos
abertos**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Área de concentração: Física Teórica e Experimental

Orientador: Prof. Dr. Diogo de Oliveira Soares Pinto

Versão Corrigida

(Versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

São Carlos

2020

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Lima, Rafael Bruno Barbosa Lima
Controle da não Markovianidade em sistemas quânticos abertos / Rafael Bruno Barbosa Lima Lima; orientador Diogo de Oliveira Soares Pinto de Oliveira Soares Pinto - versão corrigida -- São Carlos, 2020.
147 p.

Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação em Física Teórica e Experimental) -- Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2020.

1. Sistemas quânticos abertos. 2. Não-Markovianidade quântica. 3. Informação quântica. I. de Oliveira Soares Pinto, Diogo de Oliveira Soares Pinto, orient. II. Título.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Diogo de Oliveira Soares Pinto pela amizade, orientação e suporte que contribuíram muito para minha formação acadêmica ao longo desses anos, além da paciência e confiança em mim depositada.

Ao Prof. Dr. Eduardo Ribeiro de Azevedo por ceder o espaço físico onde pude realizar o trabalho.

Ao Dr. Jefferson Filgueira (gênio) agradeço as discussões, ajuda e piadas durante todo esse tempo.

Agradeço também a toda minha família, em especial meus pais João e Ivana, por todo carinho e por sempre acreditarem em mim, obrigado por serem meus pais. Ao meu irmão Antonio e minha cunhada Raissa, por todas as brincadeiras e momentos divertidos. Aos meus avós, Armando (*in memoriam*) e Oneide, por ajudarem na minha criação e por todo amor recebido, e Antonio e Heleni. Agradeço, em especial ao meu primo Wellington (Tom), por todas as horas de alegrias trazidas a São Carlos e tios. Amo muito vocês e sem o apoio recebido não estaria aqui.

Agradeço aos amigos Maiser, Marcos (Paraíba), Marsiel e Roberto, pela amizade, risadas e brincadeiras ao longo dos anos. Adoro vocês.

Agradeço aos amigos de São Carlos, Adilson (Sandy), Alessandro (Alê), Alexandre (Frutilly), Eduardo (Sagatiba), Felipe (Café), Genival (Ronaldo), Gladiane (Loba), Júlio (Verva), Leandro (Link), Leonardo (Nardão), Luís Gustavo (Banana), Matheus Schiabel e Vitor (B2). Foram muitas conversas, risadas, brincadeiras, churrascos e horas de estudos. Mesmo estando longe, vocês estão guardados no meu coração.

Aos colegas de sala Diego, Diogo e José Inácio. Obrigado por todas risadas e memes compartilhados.

Aos amigos que fiz durante a vida, Ana Perini, Antonio, Igor (Igão), Jeferson, Lucio Neves, Maurício Foschini e Otávio. Obrigado por fazerem parte da minha história.

Aos amigos que fiz recentemente em Campinas, Bruna, Márcio Tokarski, Murilo, Renata, Tamara e Thallis. Agradeço toda ajuda e paciência nesses últimos meses. Em especial agradeço a Cristina e Julia pelas conversas e aprendizado que vocês me ensinaram. Agradeço também aos amigos Cesar, Kássia Cinara e Nathália por todo carinho e conversas. Obrigado por toda companhia e posso dizer que passei meus melhores momentos em Campinas ao lado de vocês. Agradeço por fazer parte da minha vida.

Agradeço ao IFSC e seus funcionários, pela infraestrutura, conhecimento e atenção recebidas para a conclusão da minha formação acadêmica.

O presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

“O povo não deve temer seu estado. O estado deve temer seu povo.”

V de Vingança

RESUMO

LIMA, R. B. B. **Controle da não Markovianidade em sistemas quânticos abertos**. 2020. 147p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020.

Sistemas quânticos abertos têm sido alvos de diversos estudos teóricos e experimentais ao longo dos últimos anos. Em especial, pesquisas relacionadas a não Markovianidade e como ela influencia a dinâmica do sistema se tornaram relativamente importantes, pois desta forma pode-se ter o retorno das características quânticas iniciais presentes no sistema. Nesta tese foram desenvolvidos dois trabalhos relacionados acerca da influência da não Markovianidade em sistemas quânticos abertos. No primeiro, foi utilizado um sistema de um q-bit em contato com um reservatório bosônico e também sob a influência de um bombeio estocástico clássico, gerando assim um acoplamento efetivo do sistema com o ruído estocástico e o reservatório térmico. Desta forma, foi investigado como a dinâmica do qbit é modificada através da produção de não Markovianidade no sistema devido ao acoplamento efetivo e também como a energia média do sistema, com e sem o bombeio, se comporta tanto no regime Markoviano como não Markoviano. Adicionalmente, foi realizada uma análise da produção de não Markovianidade utilizando os ruídos estocásticos exponencial, Gaussiano e lei de potência. Aplicando a medida de Andersson, Cresser, Hall e Li (ACHL), foi possível fazer um comparativo do quanto de não Markovianidade foi produzida para cada ruído estocástico utilizado. No segundo trabalho, foi realizado um estudo de como é possível gerar a transição entre os regimes Markoviano e a não Markovianos por meio do controle de tempo de relaxação spin-rede de um qbit auxiliar, que atua como um ambiente. A decoerência do sistema foi simulada através da formulação de canais quânticos. Além disso, foi discutido como o mecanismo de relaxação é modificado pela ação de um campo magnético externo. Por fim, é apresentada uma demonstração experimental do modelo e sua comparação dos dados experimentais com os simulados teoricamente.

Palavras-chave: Sistemas quânticos abertos. Não-Markovianidade quântica. Informação quântica.

ABSTRACT

LIMA, R. B. B. **Non-Markovianity in open quantum systems**. 2020. 147p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020.

Open quantum systems have been aim of several theoretical and experimental studies over the last years. In particular, research related to non-Markovianity and how it influences the dynamics of the system has become relatively important, because this way we can have the return the initial quantum characteristics present in the system. In this thesis two related works were developed about the influence of non-Markovianity in open quantum systems. In the first, it was used a one qubit system in contact with a bosonic reservoir and also under the influence of a classic stochastic pumping, thus generating an effective coupling of the system with the stochastic noise and the thermal reservoir. Thus, it was investigated how the dynamics of the qubit is modified through the production of non-Markovianity in the system due to the effective coupling and also how the mean system energy, with and without pumping, behaves in both Markovian and non-Markovian regime. Additionally, an analysis of non-Markovianity production was performed using exponential, Gaussian and power law stochastic noises. Applying the Andersson, Cresser, Hall and Li (ACHL) measure, it was possible to make a comparison of how much non-Markovianity was produced for each stochastic noise. In the second work, a study was performed on how it is possible to generate the transition between Markovian to non-Markovian regimes through the control of the spin-lattice relaxation time of an ancillary qubit, which acts as an environment. The decoherence of the system was simulated through the formulation of quantum channels. In addition, it was discussed how the relaxation mechanism is modified by the action of an external magnetic field. Finally, an experimental demonstration of the model is presented and the experimental data were compared with the theoretically simulated ones.

Keywords: Open quantum systems. Quantum non-Markovianity. Quantum information.

LISTA DE FIGURAS

| | |
|---|-----|
| Figura 1 – (a) $\eta(t)$ mostrando o valor η_{\min} e (b) $\gamma_1(t)$ como função do tempo usando o bombeio exponencial para três temperaturas | 103 |
| Figura 2 – Energia média do sistema, em unidades de ω_0 , com e sem o bombeio exponencial | 104 |
| Figura 3 – $\gamma_1(t)$ em função do tempo sobre a influência de um bombeio exponencial para o regime de não Markovianidade RHP | 105 |
| Figura 4 – Energia média do sistema, em unidades de ω_0 , com e sem o bombeio Gaussiano | 106 |
| Figura 5 – $\gamma_1(t)$ em função do tempo sobre a influência de um bombeio Gaussiano para o regime de não Markovianidade RHP | 106 |
| Figura 6 – Energia média do sistema, em unidades de ω_0 , com e sem o bombeio de lei de potência | 107 |
| Figura 7 – $\gamma_1(t)$ em função do tempo sobre a influência de um bombeio de lei de potência para o regime de não Markovianidade RHP | 108 |
| Figura 8 – $\gamma_1(t)$ em função do tempo para o regime não Markoviano RHP e energias médias para os três ruídos estocásticos | 109 |
| Figura 9 – Comparação da função $f(t)$ da medida ACHL para os três ruídos estocásticos presentes com temperaturas $T = 0.10\omega_0$ | 109 |
| Figura 10 – Molécula de clorofórmio | 117 |
| Figura 11 – Simulação teórica e dados experimentais para a concentração de Fe(III) de 20 mM | 122 |
| Figura 12 – Simulação teórica e dados experimentais para a concentração de Fe(III) de 50 mM | 122 |
| Figura 13 – Simulação teórica e dados experimentais para a concentração de Fe(III) de 120 mM | 123 |
| Figura 14 – Simulação teórica e dados experimentais para a concentração de Fe(III) de 300 mM | 123 |
| Figura 15 – Simulação teórica e dados experimentais para a concentração de Fe(III) de 450 mM | 124 |

LISTA DE TABELAS

| | |
|---|-----|
| Tabela 1 – Valores numéricos da medida ACHL para os três ruídos estocásticos . . | 108 |
| Tabela 2 – Valores numéricos experimentais e teóricos dos tempos de relaxação τ_H e τ_C para diversas concentrações de Fe(III) | 121 |

SUMÁRIO

| | | |
|------------|---|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO | 17 |
| 2 | DINÂMICA EM SISTEMAS QUÂNTICOS ABERTOS | 21 |
| 2.1 | Canais quânticos | 21 |
| 2.2 | Exemplos | 27 |
| 2.2.1 | Canais unitais | 28 |
| 2.2.2 | Canais não unitais | 29 |
| 3 | EQUAÇÃO MESTRA QUÂNTICA | 31 |
| 3.1 | Sistemas quânticos fechados | 31 |
| 3.1.1 | A equação de Liouville-von Neumann | 31 |
| 3.1.2 | Série de Dyson | 32 |
| 3.2 | Equação mestra Markoviana | 33 |
| 3.3 | Método de Nakajima-Zwanzig | 38 |
| 3.3.1 | A aproximação de Born: acoplamento fraco | 44 |
| 3.3.2 | Aproximação secular | 47 |
| 3.3.3 | Função de correlação | 48 |
| 3.4 | Exemplos | 53 |
| 3.4.1 | Atenuação de amplitude | 53 |
| 3.4.2 | Oscilador harmônico | 61 |
| 3.4.3 | Atenuação de fase | 62 |
| 4 | EQUAÇÃO MESTRA ESTOCÁSTICA | 65 |
| 4.1 | O modelo Gaussiano de ruído | 65 |
| 4.2 | Evolução conjunta | 73 |
| 4.3 | Exemplos | 74 |
| 4.3.1 | Atenuação de amplitude | 74 |
| 4.3.2 | Oscilador harmônico | 77 |
| 4.3.3 | Atenuação de fase | 78 |
| 5 | MARKOVIANIDADE QUÂNTICA | 81 |
| 5.1 | Markovianidade clássica | 81 |
| 5.1.1 | Definição | 81 |
| 5.1.2 | Matriz de transição | 82 |
| 5.2 | Markovianidade quântica | 84 |
| 5.3 | Medidas de não Markovianidade | 87 |
| 5.3.1 | Medida Rivas, Huelga e Plenio (RHP) | 87 |

| | | |
|------------|---|------------|
| 5.3.2 | Medida Breuer, Lane e Piilo (BLP) | 88 |
| 5.3.3 | Medida Andersson, Cresser, Hall e Li (ACHL) | 90 |
| 5.3.4 | Volume de Bloch | 90 |
| 6 | NÃO MARKOVIANIDADE PRODUZIDA POR RUÍDOS ESTO- CÁSTICOS CLÁSSICOS | 93 |
| 6.1 | Evolução conjunta | 93 |
| 6.2 | O modelo de atenuação de amplitude | 95 |
| 6.2.1 | Atenuação de amplitude - modelo quântico | 95 |
| 6.2.2 | Atenuação de amplitude - ruído estocástico clássico | 98 |
| 6.2.3 | Evolução conjunta | 100 |
| 6.3 | Ruído exponencial (OU) | 102 |
| 6.4 | Ruído Gaussiano (SE) | 105 |
| 6.5 | Ruído lei de potência (PL) | 106 |
| 6.6 | Comparação entre os ruídos estocásticos | 107 |
| 7 | CONTROLE DA NÃO MARKOVIANIDADE PELA DISSIPACÃO DE UM Q-BIT | 111 |
| 7.1 | O Modelo - sistema de dois níveis | 111 |
| 7.1.1 | Canal de atenuação de fase | 112 |
| 7.1.2 | Canal de <i>bit-phase flip</i> | 113 |
| 7.1.3 | Sistemas de dois q-bits | 115 |
| 7.2 | Molécula de clorofórmio | 115 |
| 7.3 | Simulação do FID e da distância de traço | 117 |
| 7.4 | Resultados | 120 |
| 8 | CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS | 125 |
| | REFERÊNCIAS | 127 |
| | APÊNDICES | 137 |
| | APÊNDICE A – MÉTODO DA VARIAÇÃO DOS PARÂMETROS | 139 |
| | APÊNDICE B – POSITIVIDADE DA MATRIZ DECOERÊNCIA | 141 |
| | APÊNDICE C – O HAMILTONIANO DE <i>LAMB-SHIFT</i> | 143 |
| | APÊNDICE D – O REFERENCIAL DUPLO GIRANTE | 147 |

1 INTRODUÇÃO

Ao contrário de sistemas quânticos fechados em que usamos operadores unitários para descrever a dinâmica dos estados quânticos, para sistemas quânticos abertos podemos fazer uso do formalismo de equações mestras quânticas^a para a correta descrição da dinâmica do sistema. (2) Sistemas quânticos reais sempre trazem consigo o fato de sofrerem uma inevitável interação com o ambiente externo. Esta interação entre o sistema e o ambiente é o tema central de estudos da teoria de sistemas quânticos abertos. (2–6) Ainda, estas interações implicam no surgimento de ruído e conseqüentemente resulta na perda das características quânticas iniciais do sistema por meio da decoerência. Entender e controlar os ruídos são peças fundamentais para a implementação de tecnologias quânticas, sendo que alguns protocolos já se mostraram capazes de suprimir a decoerência, como o controle Bang-Bang (7–14), técnicas de ressonância magnética nuclear (RMN) (15), e usando um ruído estocástico externo. (16)

Nos últimos anos, pesquisadores se dedicaram a entender a relação entre a perda de informação do sistema e a não Markovianidade (17–27) e como é possível recuperá-la. (28,29) Ainda, a não Markovianidade pode ser relacionada com os refluxos de energia (30), aumento dos limites de velocidades quânticas^b (31), metrologia quântica (32), criptografia quântica (33) e controle quântico (34). Além disso, a não Markovianidade é necessária para descrições realísticas em sistemas fortemente acoplados (35,36), banhos de spins. (37) e sistemas biológicos (38)

Diversas definições de Markovianidade em sistemas quânticos podem ser encontradas na literatura (2,3,6,21,39–41), com destaque para duas: a definição RHP (Rivas-Huelga-Plenio) que se baseia no critério de divisibilidade do mapa (17), e a definição BLP (Breuer-Lane-Piilo) que se sustenta no fato que a evolução temporal da distinguibilidade entre dois estados decai monotonicamente com o passar do tempo. (42)

Nesta tese apresentamos dois trabalhos relacionados com a não Markovianidade em sistemas quânticos abertos. O primeiro se refere a mostrar como ela afeta a dinâmica de um sistema em contato com um reservatório térmico, através do bombeio de um ruído estocástico. A partir disso, foi usada a medida ACHL (Andersson-Cresser-Hall-Li) para medir o quanto de não Markovianidade está presente no sistema, sendo feita uma comparação entre três ruídos Gaussianos distintos. Adicionalmente, mostramos como a energia média do sistema se comporta, com e sem o bombeio estocástico, tanto para os

^aA equação mestra de Lindblad pode ser obtida também com o formalismo de representação do espaço de fase, que se baseia na função de distribuição de Wigner. Este tópico não será abordado na tese e o leitor pode consultar tal formalismo na Ref. (1).

^bDo inglês *Quantum Speed Limits* (QSL).

regimes Markoviano como não Markoviano.

No segundo trabalho mostramos como é possível gerar a transição entre os regimes Markovianos e não Markovianos através do controle de um parâmetro externo, em que utilizamos um sistema de dois níveis e dois canais quânticos capazes de simular a decoerência no sistema. De forma mais específica, foi aplicado os canais de atenuação de fase e *bit-phase flip* para simular a decoerência causada pelo acoplamento entre o sistema e o ambiente. Ainda, foi apresentado que o modelo proposto foi capaz de descrever a dinâmica dos spins nucleares de uma molécula de clorofórmio (CHCl_3). Vale mencionar que a transição entre os regimes Markoviano para não Markoviano foi possível devido a manipulação de um ambiente efetivo, isto é, a manipulação da variação das impurezas magnéticas na solução de CHCl_3 . Aplicando a distância de traço, mostramos como a variação do tempo de relaxação spin-rede de um q-bit auxiliar altera a dinâmica do sistema e conseqüentemente modifica a não Markovianidade presente.

A organização desta tese está da seguinte maneira: no Cap. 2 é apresentado o conceito de mapas completamente positivos que preservam o traço (CPTP), gerando assim os canais quânticos. Por fim, é apresentado de maneira breve alguns exemplos de canais quânticos.

No Cap. 3 é apresentado as propriedades físicas das equações mestras tanto para sistemas quânticos fechados como abertos. Adicionalmente, o capítulo traz a derivação da equação mestra utilizando o método de Nakajima e Zwanzig (2). O capítulo também apresenta alguns exemplos da equação mestra para alguns sistemas quânticos.

O Cap. 4 analisa a influência de campos estocásticos clássicos sobre a dinâmica de sistemas quânticos abertos (43,44), utilizando o modelo de ruído Gaussiano. Ao fim do capítulo é apresentado exemplos de equações mestras estocásticas.

No Cap. 5 são discutidos as principais definições de Markovianidade tanto clássica como quântica. Além disso, são apresentadas algumas medidas de não Markovianidade presentes na literatura, como a medida Rivas, Huelga e Plenio (RHP) (17), a medida Breuer, Lane e Piilo (BLP) (42,45), a medida Andersson, Cresser, Hall e Li (ACHL) (46), entre outras.

No Cap. 6 discutimos a não Markovianidade produzida por um bombeio estocástico clássico, onde foi usado um sistema de um q-bit em contato com um reservatório bosônico térmico. De forma mais detalhada, foi estudado como a dinâmica do sistema é afetada pelo ruído, gerando assim a não Markovianidade. No caso, utilizou-se três ruídos estocásticos: o ruído exponencial, o Gaussiano e o lei de potência, sendo no final apresentado um comparativo da não Markovianidade dos ruídos, através da medida ACHL.

O Cap. 7, foi estudado como podemos controlar a transição de regime Markovianidade para um não Markoviano através do controle do tempo de relaxação spin-rede de um

q-bit auxiliar. Para isso, usamos um sistema de dois q-bits acoplados por uma interação do tipo Ising em que cada um está sujeito a um processo de decoerência. Adicionalmente, foi realizado um experimento com uma solução de clorofórmio (CHCl_3) e o modelo teórico se mostrou capaz de simular a molécula.

Por fim, o Cap. 8 apresenta as conclusões dos trabalhos desenvolvidos e enunciamos alguns possíveis estudos de continuidade das pesquisadas desenvolvidas.

2 DINÂMICA EM SISTEMAS QUÂNTICOS ABERTOS

Neste capítulo vamos apresentar algumas definições matemáticas necessárias para o entendimento dos principais resultados desta tese. De forma geral, a Sec. 2.1 aborda o conceito de canais quânticos, trazendo as propriedades que um mapa quântico \mathcal{E} deve possuir para ser classificado como um canal, entre elas a linearidade, preservação do traço e o conceito de completa positividade. Além disso, a seção apresenta uma importante ferramenta matemática que pode ser usada para representar de forma elegante a dinâmica em sistemas quânticos abertos, chamada de representação-soma ou representação de Kraus. Por fim, a Sec. 2.2 traz alguns interessantes exemplos de canais quânticos para um melhor entendimento acerca do tema.

2.1 Canais quânticos

Nesta seção será discutido o conceito de mapas completamente positivos que preservam o traço ou simplesmente chamados de mapas CPTP (do inglês *Completely Positive Trace-Preserving*). (47–49) Estes mapas são extremamente importantes, pois um mapa quântico não pode levar a evolução do sistema a um estado qualquer. Para satisfazer tal condição é necessário que o mapa respeite algumas propriedades, para assim garantirmos que o novo estado seja um estado físico. Tais propriedades serão enunciadas logo mais abaixo. Estas informações estão baseadas nas Refs. (48, 49) que podem ser consultadas pelo leitor para maiores detalhes.

Em busca de utilizarmos uma notação adequada com as principais referências citadas acima, será usada as seguintes notações: $L(\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B)$ o conjunto de operadores lineares levando de um espaço de Hilbert \mathcal{H}_A para \mathcal{H}_B , $L(\mathcal{H})$ quando os espaços $\mathcal{H}_A = \mathcal{H}_B$ e $L^2(\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B)$ o conjunto dos super operadores levando de $L(\mathcal{H}_A)$ para $L(\mathcal{H}_B)$.

Assim, seja \mathcal{H}_A o espaço de Hilbert de dimensão $d_A = \dim \mathcal{H}_A$ e $L(\mathcal{H}_A)$ o conjunto dos operadores atuando neste espaço em questão. Pode-se então definir um operador densidade responsável por descrever o estado de um sistema quântico da seguinte maneira

$$\rho = \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|, \quad (2.1)$$

onde p_k é a probabilidade do sistema ser encontrado no estado $|\psi_k\rangle$, satisfazendo $p_k \geq 0$ e $\sum_k p_k = 1$. Entretanto, o operador densidade $\rho \in L(\mathcal{H}_A)$ deve satisfazer algumas propriedades básicas para termos um sistema físico

$$\rho^\dagger = \rho, \quad (2.2)$$

$$\rho \geq 0, \quad (2.3)$$

$$\text{Tr}(\rho) = 1. \quad (2.4)$$

Para demonstrar as propriedades acima, suponha o operador densidade escrito conforme a Eq. (2.1). Seja $|\psi_n\rangle$ um estado arbitrário, tal que

$$\begin{aligned}\langle\psi_n|\rho|\psi_n\rangle &= \sum_k p_k \langle\psi_n|\psi_k\rangle \langle\psi_k|\psi_n\rangle \\ &= \sum_k p_k |\langle\psi_n|\psi_k\rangle|^2 \\ &\geq 0.\end{aligned}\tag{2.5}$$

Ainda, ao aplicarmos o traço no operador densidade, temos

$$\begin{aligned}\text{Tr}\rho &= \text{Tr}\left(\sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle\psi_k|\right) \\ &= \sum_k p_k (\langle\psi_k|\psi_k\rangle) \\ &= \sum_k p_k = 1.\end{aligned}\tag{2.6}$$

Um operador densidade satisfazendo as propriedades 2.3 e 2.4, admite uma decomposição espectral (47)

$$\rho = \sum_k \lambda_k |\psi_k\rangle \langle\psi_k|,\tag{2.7}$$

em que $\lambda_k \in \mathbb{R}$ são autovalores não negativos de ρ .

Vamos agora introduzir o conceito de canais quânticos que sejam capazes de preservar todas as propriedades presentes nas Eqs. (2.2), (2.3), (2.4). (47) Como nosso objetivo aqui é caracterizar os mapas CPTP, enunciaremos as propriedades que tal canal quântico deve conter para ser considerado tal mapa. Seja assim $\mathcal{E}_A : L(\mathcal{H}_A) \rightarrow L(\mathcal{H}_A)$ um canal quântico que mapeia operadores densidade em operadores densidade, desta maneira vamos apresentar as propriedades que um canal quântico deve ter e depois discutir suas implicações do ponto de vista físico.

Propriedade 1 (Mapa linear) *Seja $\mathcal{E}_A : L(\mathcal{H}_A) \rightarrow L(\mathcal{H}_A)$ um canal quântico, diz-se que o canal é linear quando*

$$\mathcal{E}(\alpha X_A + \beta Y_A) = \alpha \mathcal{E}(X_A) + \beta \mathcal{E}(Y_A),\tag{2.8}$$

em que $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$ e $X_A, Y_A \in L(\mathcal{H}_A)$.

Conforme dito anteriormente, canais quânticos devem levar operadores densidade em operadores densidade, então o canal quântico \mathcal{E} deve preservar a classe de operadores densidade semidefinidos.

Definição 1 (Mapa positivo) *Um mapa linear $\mathcal{E} : L(\mathcal{H}_A) \rightarrow L(\mathcal{H}_B)$ é dito ser um mapa positivo se $\mathcal{E}(X_A)$ é positivo semidefinido, isto é, $\mathcal{E}(X_A) \geq 0$, $\forall X_A \geq 0$ ^a.*

^aUm mapa é considerado positivo se $\mathcal{E}(X_A) > 0$, $\forall X_A > 0$ e positivo semidefinido se $\mathcal{E}(X_A) \geq 0$, $\forall X_A \geq 0$. A mesma definição vale no contexto de operadores.

Porém para sistemas quânticos, somente a positividade não é uma condição suficiente para que o mapa descreva uma evolução de caráter físico. É preciso estender a definição acima para os mapas chamados completamente positivos

Propriedade 2 (Mapa completamente positivo) *Um mapa linear $\mathcal{E} : L(\mathcal{H}_A) \rightarrow L(\mathcal{H}_B)$ é um mapa completamente positivo (do inglês Completely Positive ou simplesmente CP) se sua composição $\mathcal{E} \otimes \mathbf{1}_B$ é um mapa positivo para qualquer sistema auxiliar B com espaço de Hilbert \mathcal{H}_B e dimensão $d_B = \dim \mathcal{H}_B$, ou seja, $(\mathcal{E} \otimes \mathbf{1}_B) \rho_{AB} \geq 0$. (48)*

Propriedade 3 (Preservação do traço) *Um mapa quântico $\mathcal{E}_A : L(\mathcal{H}_A) \rightarrow L(\mathcal{H}_A)$ preserva o traço se $\text{Tr}[\mathcal{E}_A(X_A)] = \text{Tr}(X_A) = 1, \forall X_A \in L(\mathcal{H}_A)$.*

A propriedade 1 decorre do fato da mecânica quântica ser linear, o que garante que o princípio de superposição é satisfeito, isto é, cada estado quântico pode ser expresso em uma base associada e podemos criar um novo estado a partir da combinação linear de outros estados quânticos.

A propriedade 2 equivale a seguinte característica: seja $\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ um espaço de Hilbert global, sendo \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B os subespaços de Hilbert de um sistema quântico arbitrário e um sistema auxiliar, respectivamente. Assim, mesmo ao adicionar-se o subespaço auxiliar, a evolução do sistema global deve representar uma evolução física que respeita os vínculos das Eqs. (2.2), (2.3), (2.4). Desta forma, a evolução do sistema global não deve ser alterada devido à presença do sistema auxiliar, representando assim uma evolução física. Logo, escrevendo tal condição de forma matemática, a composição do mapa do sistema quântico e auxiliar, $\mathcal{E} \otimes \mathbf{1}_B$ também deve ser positiva. Além disso, esta propriedade garante que os autovalores, λ , do operador densidade obedecem a relação $\lambda \geq 0$.

Vamos apresentar agora um exemplo do porque a condição do mapa ser completamente positivo (CP) é importante. Tal exemplo se baseia no operador de transposição aplicado em um q-bit e pode ser encontrado na Ref. (47) Seja ρ o operador densidade definido como

$$\rho = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Aplicando o operador transposição T , temos

$$\rho^T = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

sendo que o mapa preserva a positividade. Suponha agora que o operador densidade descreva um sistema bipartido e o mesmo esteja em um estado inicial emaranhado

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle). \quad (2.11)$$

O operador densidade é então

$$\rho_{AB} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Aplicando o operador de transposição apenas no subsistema A

$$\rho_{AB}^{T_A} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

sendo seus autovalores $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 1/2$, $\lambda_4 = -1/2$. Isso mostra que $\rho_{AB}^{T_A}$ não é um operador densidade válido, já que possui um autovalor negativo. Com isso mostramos que o operador transposição é um exemplo de um mapa positivo, mas que não possui a propriedade de ser completamente positivo. (47)

Assim, com a combinação das propriedades 1, 2 e 3, podemos definir transformações quânticas gerais que obedecem as propriedade de serem completamente positivos e preservarem o traço (CPTP), conhecidos como canais quânticos. Estes canais são necessários para descrever a dinâmica de um sistema quântico aberto no qual somente a evolução unitária não é suficiente, pois existe um acoplamento com o reservatório e muitas vezes não temos acesso aos seus graus de liberdade, sendo necessário eliminá-los com o uso do traço parcial.

Adicionalmente, vamos apresentar outras importantes definições e propriedades úteis no contexto de mapas CPTP. A primeira é o operador de Choi ou matriz de Choi, outra maneira útil de avaliar a positividade completa do mapa. (50)

Definição 2 (Operador de Choi) *Considere dois espaços de Hilbert \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B de dimensões $d_A = \dim \mathcal{H}_A$ e $d_B = \dim \mathcal{H}_B$, respectivamente. Sendo $\{|k\rangle_A \mid k = 1, \dots, d_A\}$ e $\{|k\rangle_B \mid k = 1, \dots, d_B\}$ a base dos subespaços em questão, o operador de Choi referente ao mapa $\mathcal{E}_A : L(\mathcal{H}_A) \rightarrow L(\mathcal{H}_A)$ é*

$$(\mathcal{E}_A \otimes \mathbf{1}_B)(|\Omega\rangle_{AB} \langle \Omega|_{AB}) = \frac{1}{d_A d_B} \sum_{j,k} \mathcal{E}_A(|j\rangle_A \langle k|_A) \otimes |j\rangle_B \langle k|_B, \quad (2.14)$$

onde $|\Omega\rangle_{AB}$ é o estado maximamente emaranhado, atuando no espaço $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, definido por

$$|\Omega\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{d_A d_B}} \sum_k |k\rangle_A \otimes |k\rangle_B. \quad (2.15)$$

Observe que se o mapa \mathcal{E}_A é dito ser completamente positivo, então o operador de Choi é positivo semidefinido, ou seja, $(\mathcal{E}_A \otimes \mathbf{1}_B)(|\Omega\rangle_{AB}\langle\Omega|_{AB}) \geq 0$. Isto se deve ao fato que o estado maximamente emaranhado, $|\Omega\rangle_{AB}$ define um operador densidade puro que é positivo semidefinido. Esta definição se torna relevante, pois através dela podemos avaliar se um mapa é completamente positivo, apenas analisando se o operador de Choi é positivo semidefinido.

Outro fato que vale a pena ser ressaltado é o teorema a seguir. Ele se tornará útil para a construção da definição da Markovianidade BLP, presente na definição 8 do Cap. 5. A demonstração do teorema pode ser consultada na Ref. (17)

Teorema 1 *Um mapa linear $\mathcal{E} : L(\mathcal{H}_A) \rightarrow L(\mathcal{H}_A)$ que preserva o traço, é positivo se, e somente se, para qualquer operador Hermitiano $X_A \in \mathcal{H}_A$,*

$$\|\mathcal{E}(X_A)\|_1 \leq \|X_A\|_1, \quad (2.16)$$

onde $\|X\|_1 = \text{Tr}\sqrt{X^\dagger X}$ é chamado de norma traço.

Prova: Será feita a demonstração do teorema, pois este traz consigo uma importante riqueza de detalhes que serão explorados no capítulo 5. Assumindo que \mathcal{E} é positivo e preserva o traço, então para qualquer operador positivo semidefinido $X \geq 0$ a norma traço é preservada, isto é, $\|\mathcal{E}(X)\|_1 = \|X\|_1$. Usando a decomposição espectral em um operador X , não necessariamente positivo semidefinido, podemos escrever o operador da seguinte maneira $X = X^+ - X^-$, em que $X^\pm = \pm \sum_k \lambda_k^\pm |\psi_k^\pm\rangle\langle\psi_k^\pm|$, sendo λ_k^+ e λ_k^- os autovalores positivos e negativos de X , respectivamente. Então $\|X\|_1 = \sum_k |\lambda_k|$, sendo igual ao traço se o operador é positivo. Assim,

$$\begin{aligned} \|\mathcal{E}(X)\|_1 &= \|\mathcal{E}(X^+) - \mathcal{E}(X^-)\|_1 \\ &\leq \|\mathcal{E}(X^+)\|_1 + \|\mathcal{E}(X^-)\|_1 \\ &= \|X^+\|_1 + \|X^-\|_1 \\ &= \|X\|_1 \\ \|\mathcal{E}(X)\|_1 &\leq \|X\|_1. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Repare que o termo X^- também é positivo, pois os λ^- juntamente com o sinal negativo em sua definição, levam o operador ser positivo

$$X^- = - \underbrace{\sum_k \lambda_k^-}_{>0} |\psi_k^- \rangle \langle \psi_k^-|. \quad (2.18)$$

Vamos agora fazer o caminho inverso do teorema. Assumindo que \mathcal{E} satisfaz a Eq. (2.16) e preserva o traço, um operador $X \geq 0$, temos

$$\begin{aligned} \|X\|_1 &= \text{Tr}(X) = \text{Tr}[\mathcal{E}(X)] \\ &\leq \|\mathcal{E}(X)\|_1 \\ &\leq \|X\|_1, \end{aligned} \tag{2.19}$$

gerando a relação $\|\mathcal{E}(X)\|_1 = \text{Tr}[\mathcal{E}(X)]$. Assim, $\|X\|_1 = \text{Tr}(X)$ se, e somente se, $X \geq 0$, obtendo $\mathcal{E}(X) \geq 0$, demonstrando o teorema acima.

Por fim, vamos mencionar um importante teorema presente na literatura conhecido como teorema de Choi-Kraus ou representação soma. Tal teorema representa uma forma elegante e bastante útil de representar operações quânticas, visto que a manipulação dos mapas nesta representação se torna de forma geral mais simples. A demonstração do seguinte teorema pode ser encontrada na Ref. (47) e devido sua importância será apresentada logo abaixo.

Teorema 2 (Teorema de Kraus) *Seja $\mathcal{E}_A : L(\mathcal{H}_A) \rightarrow L(\mathcal{H}_A)$ um canal quântico linear, completamente positivo e que preserva o traço. Então o canal admite a representação de Kraus*

$$\mathcal{E}_A(\rho) = \sum_k E_k \rho E_k^\dagger, \tag{2.20}$$

em que $\rho \in \mathcal{H}_A$ e $E_k \in L(\mathcal{H}_A)$ são chamados de operadores de Kraus, que satisfazem a propriedade

$$\sum_k E_k^\dagger E_k = \mathbf{1}_A. \tag{2.21}$$

Sejam os operadores densidade ρ_S e ρ_A que descrevem o sistema quântico e o ambiente, respectivamente. A evolução do sistema conjunto é descrita pela seguinte equação

$$\rho_{SA}(t) = U(t)(\rho_S \otimes \rho_A)U^\dagger(t), \tag{2.22}$$

em que o estado inicial é dado por $\rho_{SA} = \rho_S \otimes \rho_A$. Entretanto, nosso foco se concentra em determinar a evolução somente do sistema, devendo dessa maneira, eliminar as variáveis do ambiente. Isso resulta em

$$\rho_S(t) = \mathcal{E}(\rho_{SA}) = \text{Tr}_A [U(t)(\rho_S \otimes \rho_A)U^\dagger(t)]. \tag{2.23}$$

Seja $\{|e_k\rangle\}$ uma base ortonormal do espaço de Hilbert do ambiente e seu operador densidade escrito da seguinte maneira

$$\rho_A = \sum_k |e_k\rangle \langle e_k|, \tag{2.24}$$

com $0 \leq p_k \leq 1$ e $\sum_k p_k = 1$. Substituindo ρ_A na Eq. (2.23), o operador densidade se torna

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}(\rho_{SA}) &= \text{Tr}_A \left[U(t)(\rho_S \otimes \rho_A)U^\dagger(t) \right] \\
&= \sum_{k,n} p_k \langle e_n | U(t) (\rho_S \otimes |e_k\rangle \langle e_k|) U^\dagger(t) |e_n\rangle \\
&= \sum_{k,n} p_k \langle e_n | U(t) |e_k\rangle \rho_S \langle e_k | U^\dagger(t) |e_n\rangle \\
&= \sum_{k,n} \sqrt{p_k} \langle e_n | U(t) |e_k\rangle \rho_S \sqrt{p_k} \langle e_k | U^\dagger(t) |e_n\rangle \\
&= \sum_{k,n} E_{k,n}(t) \rho_S E_{k,n}^\dagger(t), \tag{2.25}
\end{aligned}$$

portanto

$$\rho_S(t) = \sum_{k,n} E_{k,n}(t) \rho_S E_{k,n}^\dagger(t), \tag{2.26}$$

em que

$$E_{k,n}(t) = \sqrt{p_k} \langle e_n | U(t) |e_k\rangle. \tag{2.27}$$

Os operadores $E_{k,n}(t)$ atuam somente no espaço de Hilbert do sistema e são chamados de operadores de Kraus. A Eq. (2.25) é conhecida como representação de operador-soma de \mathcal{E} . (47) Estes operadores ainda satisfazem a chamada relação de completeza, dada por

$$\begin{aligned}
\text{Tr} [\mathcal{E}(\rho_{SA})] &= \text{Tr} \left[\sum_{k,n} E_{k,n}(t) \rho_S E_{k,n}^\dagger(t) \right] \\
&= \text{Tr} \left[\sum_{k,n} E_{k,n}^\dagger(t) E_{k,n}(t) \rho_S \right] \\
&= 1. \tag{2.28}
\end{aligned}$$

Como a relação acima é sempre verdadeira para qualquer ρ_S , temos que os operadores de Kraus satisfazem

$$\sum_{k,n} E_{k,n}^\dagger(t) E_{k,n}(t) = \mathbf{1}. \tag{2.29}$$

A representação de operador-soma é importante pois é possível calcular a dinâmica do sistema quântico de uma forma prática, facilitando assim os cálculos necessários. (47) Vale mencionar o fato de que os operadores de Kraus não são definidos de forma única, sendo que conforme muda-se a base do espaço de Hilbert do sistema, temos também uma mudança nos operadores de Kraus. Assim,

$$\rho_S(t) = \mathcal{E}(\rho_{SA}) = \sum_k p_k \rho_k = \sum_k E_k(t) \rho_S E_k^\dagger(t). \tag{2.30}$$

2.2 Exemplos

Nesta seção serão apresentados alguns exemplos dos principais canais quânticos atualmente usados na literatura. Todos os exemplos citados aqui podem ser encontrados na Ref. (47)

2.2.1 Canais unitais

O canal de *bit flip* basicamente troca o estado de um qbit de $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$ com probabilidade $1 - p$ e faz o processo inverso de troca $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$ com probabilidade p . Pode-se escrever os operadores de Kraus do canal quântico como

$$E_0 = \sqrt{p} \mathbf{1} = \sqrt{p} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad E_1 = \sqrt{1-p} \sigma_x = \sqrt{1-p} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.31)$$

Usando a Eq. (2.30), podemos escrever a dinâmica do sistema quântico

$$\rho_S = \mathcal{E}(\rho_{SA}) = E_0 \rho_S E_0^\dagger + E_1 \rho_S E_1^\dagger. \quad (2.32)$$

Considerando um sistema bipartido $A \otimes B$, de dimensão 2×2 cada um, na qual o canal está somente atuando no sistema A , devemos reescrever os operadores de Kraus de modo a adequar com a dimensão do espaço de Hilbert conjunto. Assim, temos

$$E_0 \rightarrow E_0 \otimes \mathbf{1} = \sqrt{p} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} = \sqrt{p} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (2.33)$$

$$E_1 \rightarrow E_1 \otimes \mathbf{1} = \sqrt{1-p} \sigma_x \otimes \mathbf{1} = \sqrt{1-p} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.34)$$

Caso tenhamos dois canais quânticos atuando em seus respectivos qbits, o processo de extensão do espaço de Hilbert é feito de forma análoga ao apresentado acima.

O canal de *phase flip* possui os seguintes operadores de Kraus

$$E_0 = \sqrt{p} \mathbf{1} = \sqrt{p} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad E_1 = \sqrt{1-p} \sigma_z = \sqrt{1-p} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (2.35)$$

Podemos ter ainda uma combinação de ambos os canais, denominado *bit-phase flip* e seus operadores de Kraus são descritos como

$$E_0 = \sqrt{p} \mathbf{1} = \sqrt{p} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad E_1 = \sqrt{1-p} \sigma_y = \sqrt{1-p} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.36)$$

Outro importante canal quântico, chamado de canal de atenuação de fase^b. Ele descreve um processo em que temos uma certa perda de informação quântica mas sem perda de energia. Seus operadores de Kraus são escritos como

$$E_0 = \sqrt{\alpha} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad E_1 = \sqrt{1-\alpha} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (2.37)$$

^bDo inglês *phase damping channel*

Vale mencionar que o canal de atenuação de fase é exatamente idêntico ao canal *phase flip*. Este fato vem de que historicamente, o canal de atenuação de fase era pensado como resultado de processos de espalhamento ou *random phase kick*. (47) Somente após algum tempo a conexão entre os dois canais foi descoberta.

Esta seção tem um caráter apenas expositivo, no intuito de somente apresentar ao leitor alguns exemplos de canais quânticos mais comuns que podem ser encontrados na literatura, não trazendo consigo nenhum aspecto de aprofundamento matemático. O leitor mais interessado pode buscar uma discussão mais completa acerca do tema nas Refs. (47–49)

Conforme apresentada na Eq. (2.29), todo canal representado pelo operador soma obedece a relação

$$\sum_k E_k^\dagger(t) E_k(t) = \mathbf{1}. \quad (2.38)$$

Adicionalmente, os canais ditos unitais apresentam a seguinte propriedade matemática

$$\sum_k E_k^\dagger(t) E_k(t) = \mathbf{1} \Leftrightarrow \sum_k E_k(t) E_k^\dagger(t) = \mathbf{1}. \quad (2.39)$$

2.2.2 Canais não unitais

O canal de atenuação de amplitude^c descreve importantes processos físicos, na qual temos dissipação de energia do sistema quântico. Os operadores de Kraus são escritos da seguinte maneira

$$E_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-\gamma} \end{bmatrix}, \quad E_1 = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{\gamma} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.40)$$

O operador E_1 descreve a troca do estado $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$, sendo equivalente ao processo físico de perda de um *quanta* de energia para o ambiente. Já o operador E_0 não troca o estado $|0\rangle$, mas atenua a amplitude do estado $|1\rangle$. Para os canais ditos não unitais a propriedade apresentada na Eq. (2.39) não é válida, pois nem todos os operadores de Kraus são hermitianos. Veja o exemplo a seguir para o canal de atenuação de amplitude

$$\begin{aligned} \sum_k E_k^\dagger E_k &= E_0^\dagger E_0 + E_1^\dagger E_1 \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-\gamma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-\gamma} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sqrt{\gamma} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\gamma} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1-\gamma \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \gamma \end{pmatrix} = \mathbf{1}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

^cDo inglês *amplitude damping channel*.

Para o inverso, temos

$$\begin{aligned}\sum_k E_k E_k^\dagger &= E_0 E_0^\dagger + E_1 E_1^\dagger \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 - \gamma \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \gamma & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 + \gamma & 0 \\ 0 & 1 - \gamma \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{2.42}$$

Com este exemplo podemos observar que

$$\sum_k E_k^\dagger E_k \neq \sum_k E_k E_k^\dagger.\tag{2.43}$$

3 EQUAÇÃO MESTRA QUÂNTICA

O objetivo deste capítulo é apresentar e discutir as propriedades físicas das equações mestra tanto para sistemas quânticos fechados como abertos. No caso de sistemas fechados a dinâmica do operador densidade se dá por meio da equação de Liouville-von Neumann (2), apresentada na Sec. 3.1. No caso de sistemas quânticos abertos, na Sec. 3.2 será apresentada a forma geral de uma equação mestra Markoviana local no tempo e quais propriedades tal equação deve obedecer para ser caracterizada como tal. A Sec. 3.3 apresenta a derivação da equação mestra utilizando o método desenvolvido por Nakajima e Zwanzig (2), na qual faz-se uso de dois projetores ortogonais que serão definidos posteriormente. Vale ressaltar que este método se mostra mais geral que a dedução tradicional, pois assume que os coeficientes da equação mestra são explicitamente dependentes do tempo. Por fim, na Sec. 3.4 é apresentado alguns exemplos da equação mestra para sistemas quânticos mais comuns presentes na literatura.

3.1 Sistemas quânticos fechados

3.1.1 A equação de Liouville-von Neumann

Para sistemas quânticos fechados podemos fazer uso do formalismo de função de onda para descrever o sistema. Seja $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$ em um tempo t , sendo \mathcal{H} o espaço de Hilbert do sistema, a evolução da função de onda do sistema é

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad (3.1)$$

em que $U(t, t_0)$ é o operador unitário de evolução temporal, satisfaz a seguinte relação $U(t, t_0)U^\dagger(t, t_0) = U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = \mathbf{1}$ e para H independente do tempo, $U(t, t_0)$ é definido como

$$U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}, \quad (3.2)$$

na qual $H \in L(\mathcal{H})$ é o Hamiltoniano do sistema. Tomando a derivada da Eq. (3.1), temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= \frac{d}{dt} U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} H U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} H |\psi(t)\rangle, \end{aligned} \quad (3.3)$$

em que \hbar é a constante reduzida de Planck e por motivos de simplicidade vamos considerar $\hbar = 1$. A Eq. (3.3) é conhecida como a equação de Schrödinger. (51) Usando o formalismo do operador densidade, a Eq. (3.3) naturalmente se torna

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = -i [H, \rho(t)], \quad (3.4)$$

conhecida como equação de Liouville-von Neumann. (2)

3.1.2 Série de Dyson

Entretanto, no caso de sistemas quânticos na qual o Hamiltoniano é dependente do tempo, o operador evolução temporal $U(t, t_0)$ não assume a forma simples conforme a Eq. (3.2). Usando a Eq. (3.3)

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -iH(t) |\psi(t)\rangle, \quad (3.5)$$

e aplicando a a Eq. (3.1), temos que o $U(t, t_0)$ obedece a equação diferencial

$$\frac{d}{dt} U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = -iH(t)U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \Rightarrow \frac{d}{dt} U(t, t_0) = -iH(t)U(t, t_0). \quad (3.6)$$

Integrando a equação e usando a condição inicial $U(t_0, t_0) = \mathbf{1}$, temos que

$$U(t, t_0) = \mathbf{1} - i \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1)U(t_1, t_0). \quad (3.7)$$

Nosso próximo passo é fazer uma relação de recorrência, na qual substituímos a Eq. (3.7) nela mesmo, obtendo

$$U(t, t_0) = \mathbf{1} - i \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) + (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_2)U(t_2, t_0), \quad (3.8)$$

sendo este processo repetido indefinidamente, chegando finalmente na solução desejada, chamada de série de Dyson (3)

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) \dots H(t_n) \\ &= \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \mathcal{T} \left[\left(\int_{t_0}^t ds H(s) \right)^n \right] \\ &= \mathcal{T} \left[\sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \left(-i \int_{t_0}^t ds H(s) \right)^n \right] \\ &= \mathcal{T} \left[e^{-i \int_{t_0}^t ds H(s)} \right], \end{aligned} \quad (3.9)$$

em que \mathcal{T} representa o operador de ordenamento temporal (2) e foi usado a série de expansão da exponencial $e^x = \sum_{n=0}^{+\infty} x^n/n!$. Quando o Hamiltoniano comuta com ele mesmo em diferentes instantes de tempos,

$$[H(t), H(t')] = 0, \quad \text{com } t \neq t', \quad (3.10)$$

então todos os Hamiltonianos comutam entre si e a série de Dyson simplesmente assume uma forma menos complexa

$$U(t, t_0) = e^{-i \int_{t_0}^t ds H(s)}. \quad (3.11)$$

3.2 Equação mestra Markoviana

Nesta seção será apresentada a forma geral de uma equação mestra Markoviana local no tempo, isto é, ela somente depende do instante de tempo atual, não dependendo dos instantes de tempo passados. Conforme veremos no Cap. 5, os coeficientes da equação mestra^a são de grande importância devido ao fato de que eles são usados nas medidas de Markovianidade presentes atualmente na literatura.

Suponha um sistema fechado $S + B$, preparado no instante inicial $t = t_0$ como um estado $\rho_{SB}(t) = \rho_S(t_0) \otimes \rho_B$, em que $\rho_S(t_0)$ é o estado inicial do sistema reduzido S e ρ_B representa um estado do ambiente, como por exemplo, um estado de um reservatório térmico. A evolução de $\rho_S(t)$ é descrita por um mapa dinâmico quântico, conforme apresentado no Cap. 2,

$$\rho_S(t) = \mathcal{E}[\rho_S(t_0)] = \text{Tr}_B \left\{ U(t)[\rho_S(t_0) \otimes \rho_B]U^\dagger(t) \right\}. \quad (3.12)$$

Nosso objetivo aqui é construir uma forma geral da equação mestra local no tempo (2,46), em que vamos considerar $\rho_S(t) \in L(\mathcal{H}_S)$ e $\mathcal{L}_t \in L^2(\mathcal{H}_S)$. Para um semigrupo dinâmico, existe um mapa linear \mathcal{L} (gerador do semigrupo), em que podemos escrever o semigrupo na seguinte forma (2)

$$\mathcal{E} = e^{\mathcal{L}t}, \quad (3.13)$$

nos levando a equação diferencial para o sistema quântico S

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = \mathcal{L}_t\rho_S(t), \quad (3.14)$$

chamada de equação mestra quântica Markoviana

Vamos agora construir a forma mais geral do gerador \mathcal{L}_t . Para isso, considere um espaço de Hilbert \mathcal{H}_S de dimensão finita, $\dim \mathcal{H}_S = d$, escolhamos uma base completa de operadores ortonormais, $F_i, i = 1, 2, \dots, d^2$, tal que^b

$$\langle F_i, F_j \rangle \equiv \text{Tr}_S(F_i^\dagger F_j) = \delta_{ij}. \quad (3.15)$$

Por conveniência, os operadores F_i são escolhidos da seguinte maneira

$$F_{d^2} = \frac{1}{\sqrt{d}} \mathbf{1}_S, \quad (3.16)$$

$$\text{Tr}_S(F_i) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, d^2 - 1. \quad (3.17)$$

^aTais coeficientes também são chamados de taxas de decaimento ou taxas de decoerência.

^bFoi adotada a notação de produto interno entre dois vetores/operadores \mathbf{u} e \mathbf{v} como sendo

$$\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \text{Tr}(\mathbf{u}^\dagger, \mathbf{v}).$$

Porém alguns livros usam a notação de produto interno como (\mathbf{u}, \mathbf{v}) .

Como o gerador \mathcal{L}_t é um superoperador linear, ele admite uma representação de Kraus. Pelo teorema 2, temos

$$\mathcal{L}_t \rho_S(t) = \sum_{\alpha, \beta} W_{\alpha\beta}(t) \rho_S(t) W_{\alpha\beta}^\dagger(t), \quad (3.18)$$

em que $W_{\alpha\beta}(t)$ atuando em \mathcal{H}_S e satisfazem a condição de completiza

$$\sum_{\alpha, \beta} W_{\alpha\beta}^\dagger(t) W_{\alpha\beta}(t) = \mathbf{1}_S. \quad (3.19)$$

Expressando os operadores $W_{\alpha\beta}(t)$ em termos dos operadores F_i

$$W_{\alpha\beta}(t) = \sum_{i=1}^{d^2} F_i \langle F_i, W_{\alpha\beta}(t) \rangle. \quad (3.20)$$

Assim, é possível escrever a ação do mapa dinâmico \mathcal{L}_t

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_t \rho_S(t) &= \sum_{\alpha, \beta} W_{\alpha\beta}(t) \rho_S(t) W_{\alpha\beta}^\dagger(t), \\ &= \sum_{\alpha, \beta} \left(\sum_{i=1}^{d^2} F_i \langle F_i, W_{\alpha\beta}(t) \rangle \right) \rho_S(t) \left(\sum_{j=1}^{d^2} F_j^\dagger \langle F_j, W_{\alpha\beta}(t) \rangle^* \right) \\ &= \sum_{i, j=1}^{d^2} \sum_{\alpha, \beta} \langle F_i, W_{\alpha\beta}(t) \rangle \langle F_j, W_{\alpha\beta}(t) \rangle^* F_i \rho_S(t) F_j^\dagger \\ &= \sum_{i, j=1}^{d^2} c_{ij}(t) F_i \rho_S(t) F_j^\dagger, \end{aligned} \quad (3.21)$$

em que os elementos

$$c_{ij}(t) = \sum_{\alpha, \beta} \langle F_i, W_{\alpha\beta}(t) \rangle \langle F_j, W_{\alpha\beta}(t) \rangle^*, \quad (3.22)$$

formam a chamada matriz de decoerência (46), sendo ela hermitiana e positiva. (2) Para demonstrar tal fato, temos que para qualquer vetor complexo v de dimensão d^2 (2)

$$\begin{aligned} \sum_{i, j} c_{ij} v_i^* v_j &= \sum_{i, j} \sum_{\alpha, \beta} \langle F_i, W_{\alpha\beta}(t) \rangle \langle F_j, W_{\alpha\beta}(t) \rangle^* v_i^* v_j \\ &= \sum_{\alpha, \beta} \left\langle \sum_i v_i^* F_i, W_{\alpha\beta}(t) \right\rangle \left\langle \sum_j v_j F_j, W_{\alpha\beta}(t) \right\rangle^* \\ &= \sum_{\alpha, \beta} \left| \left\langle \sum_i v_i F_i, W_{\alpha, \beta}(t) \right\rangle \right|^2 \geq 0. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Abrindo a soma da Eq. (3.21) nos termos em que os pares de índices $\{i, j\}$ são $\{i = d^2, j = d^2\}$, $\{i = d^2, j\}$ e $\{i, j = d^2\}$, temos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_t \rho_S(t) &= c_{d^2 d^2}(t) F_{d^2} \rho_S(t) F_{d^2}^\dagger \\ &\quad + \sum_{i=1}^{d^2-1} c_{i d^2}(t) F_i \rho_S(t) F_{d^2}^\dagger + \sum_{j=1}^{d^2-1} c_{d^2 j}(t) F_{d^2} \rho_S(t) F_j^\dagger \\ &\quad + \sum_{i, j=1}^{d^2-1} c_{ij}(t) F_i \rho_S(t) F_j^\dagger \end{aligned} \quad (3.24)$$

Aplicando as definições das Eqs. (3.16) e (3.17) na Eq. (3.24)

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_t \rho_S(t) &= c_{d^2 d^2}(t) \frac{\mathbb{1}_S}{\sqrt{d}} \rho_S(t) \frac{\mathbb{1}_S}{\sqrt{d}} \\ &+ \sum_{i=1}^{d^2-1} c_{id^2}(t) F_i \rho_S(t) \frac{\mathbb{1}_S}{\sqrt{d}} + \sum_{j=1}^{d^2-1} c_{d^2 j}(t) \frac{\mathbb{1}_S}{\sqrt{d}} \rho_S(t) F_j^\dagger \\ &+ \sum_{i,j=1}^{d^2-1} c_{ij}(t) F_i \rho_S(t) F_j^\dagger.\end{aligned}\quad (3.25)$$

Agrupando os termos proporcionais a $\bullet \rho_S(t)$ e $\rho_S(t) \bullet$ da Eq. (3.25)

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_t \rho_S(t) &= \left[\frac{1}{2} \frac{c_{d^2 d^2}(t)}{d} + \sum_{i=1}^{d^2-1} \frac{c_{id^2}(t)}{\sqrt{d}} F_i \right] \rho_S(t) \\ &+ \rho_S(t) \left[\frac{1}{2} \frac{c_{d^2 d^2}(t)}{d} + \sum_{j=1}^{d^2-1} \frac{c_{d^2 j}(t)}{\sqrt{d}} F_j^\dagger \right] \\ &+ \sum_{i,j=1}^{d^2-1} c_{ij}(t) F_i \rho_S(t) F_j^\dagger.\end{aligned}\quad (3.26)$$

Definindo a grandeza

$$G(t) \equiv \frac{1}{2} \frac{c_{d^2 d^2}(t)}{d} + \sum_{i=1}^{d^2-1} \frac{c_{id^2}(t)}{\sqrt{d}} F_i, \quad (3.27)$$

e consequentemente seu hermitiano conjugado

$$G^\dagger(t) \equiv \frac{1}{2} \frac{c_{d^2 d^2}(t)}{d} + \sum_{j=1}^{d^2-1} \frac{c_{d^2 j}(t)}{\sqrt{d}} F_j^\dagger, \quad (3.28)$$

em que os índices do coeficiente $c_{d^2 j}(t)$ foram rearranjados. Substituindo as definições acima na Eq. (3.26) implica

$$\mathcal{L}_t \rho_S(t) = G(t) \rho_S(t) + \rho_S(t) G^\dagger(t) + \sum_{i,j=1}^{d^2-1} c_{ij}(t) F_i \rho_S(t) F_j^\dagger. \quad (3.29)$$

Como o semigrupo preserva o traço, o gerador obedece a relação $\text{Tr}_S[\mathcal{L}_t \rho_S(t)] = 0$ (2) e usando as propriedades cíclica e linearidade do traço^c

$$\begin{aligned}0 &= \text{Tr}_S \left[G(t) \rho_S(t) + \rho_S(t) G^\dagger(t) + \sum_{i,j=1}^{d^2-1} c_{ij}(t) F_i \rho_S(t) F_j^\dagger \right] \\ &= \text{Tr}_S \left\{ \left[G(t) + G^\dagger(t) + \sum_{i,j=1}^{d^2-1} c_{ij}(t) F_j^\dagger F_i \right] \rho_S(t) \right\},\end{aligned}\quad (3.30)$$

temos que

$$G(t) + G^\dagger(t) = - \sum_{i,j=1}^{d^2-1} c_{ij}(t) F_j^\dagger F_i. \quad (3.31)$$

^cSendo A, B e C três operadores, o traço é invariante sobre permutações cíclicas, isto é, $\text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(CAB) = \text{Tr}(BCA)$ e também vale a relação de linearidade $\text{Tr}(A + B + C) = \text{Tr}(A) + \text{Tr}(B) + \text{Tr}(C)$.

Definindo um operador hermitiano $H(t)$ como

$$H(t) = \frac{1}{2i} [G(t) - G^\dagger(t)], \quad (3.32)$$

os operadores $G(t)$ e $G^\dagger(t)$ são reescritos da seguinte maneira

$$G(t) = -iH(t) - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{d^2-1} c_{ij}(t) F_j^\dagger F_i \quad (3.33)$$

$$G^\dagger(t) = iH(t) - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{d^2-1} c_{ij}(t) F_j^\dagger F_i. \quad (3.34)$$

Substituindo as Eqs. (3.33) e (3.34) na Eq. (3.29), temos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_t \rho_S(t) &= -iH(t)\rho_S(t) - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{d^2-1} c_{ij}(t) F_j^\dagger F_i \rho_S(t) \\ &\quad + i\rho_S(t)H(t) - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{d^2-1} c_{ij}(t) \rho_S(t) F_j^\dagger F_i \\ &\quad + \sum_{i,j=1}^{d^2-1} c_{ij}(t) F_i \rho_S(t) F_j^\dagger, \end{aligned} \quad (3.35)$$

resultando na seguinte equação mestra^d

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -i[H(t), \rho_S(t)] + \sum_{i,j=1}^{d^2-1} c_{ij}(t) \left[F_i \rho_S(t) F_j^\dagger - \frac{1}{2} \{F_j^\dagger F_i, \rho_S(t)\} \right], \quad (3.36)$$

em que o comutador é definido como $[A, B] \equiv AB - BA$ e o anticomutador $\{A, B\} \equiv AB + BA$. Como a matriz decoerência é hermitiana, ela admite uma decomposição espectral e pode ser diagonalizada através de uma base adequada

$$u c(t) u^\dagger = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \gamma_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \gamma_{d^2-1} \end{pmatrix} \Rightarrow c_{ij}(t) = \sum_{k=1}^{d^2-1} u_{ik}(t) \gamma_k(t) u_{jk}^*(t). \quad (3.37)$$

Substituindo a decomposição diagonal na Eq. (3.36), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_S(t) &= -i[H(t), \rho_S(t)] \\ &\quad + \sum_{i,j=1}^{d^2-1} \left[\sum_k u_{ik}(t) \gamma_k(t) u_{jk}^*(t) \right] \left[F_i \rho_S(t) F_j^\dagger - \frac{1}{2} \{F_j^\dagger F_i, \rho_S(t)\} \right] \\ &= -i[H(t), \rho_S(t)] + \sum_{k=1}^{d^2-1} \gamma_k(t) \left\{ \left[\sum_{i=1}^{d^2-1} u_{ik}(t) F_i \right] \rho_S(t) \left[\sum_{j=1}^{d^2-1} u_{jk}^*(t) F_j^\dagger \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left\{ \left[\sum_{j=1}^{d^2-1} u_{jk}^*(t) F_j^\dagger \right] \left[\sum_{i=1}^{d^2-1} u_{ik}(t) F_i \right], \rho_S(t) \right\} \right\}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

^dLembrando que segundo a Eq. (3.12), o termo $\mathcal{L}_t \rho_S(t)$ se relaciona com o operador densidade do sistema, $\rho_S(t)$, pela relação $\frac{d}{dt} \rho_S(t) = \mathcal{L}_t \rho_S(t)$.

Definindo os operadores $L_k(t)$ conforme segue

$$L_k(t) = \sum_{i=1}^{d^2-1} u_{ik}(t) F_i \quad (3.39)$$

$$L_k^\dagger(t) = \sum_{j=1}^{d^2-1} u_{jk}^*(t) F_j^\dagger, \quad (3.40)$$

resulta na equação mestra local no tempo

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -i [H(t), \rho_S(t)] + \sum_{k=1}^{d^2-1} \gamma_k(t) \left[L_k(t) \rho_S(t) L_k^\dagger(t) - \frac{1}{2} \{ L_k^\dagger(t) L_k(t), \rho_S(t) \} \right]. \quad (3.41)$$

A Eq. (3.41) é a forma mais geral de uma equação mestra local no tempo, em que o operador $H(t)$ é hermitiano, $L_k(t)$ são operadores lineares e ortonormais, e os coeficientes da equação mestra, $\gamma_k(t) \in \mathbb{R}^+$, são conhecidos como taxas de decoerência ou taxas de decaimento^e. A equação mestra nos mostra que caso tenhamos um sistema quântico aberto, a dinâmica pode ser dividida em dois termos. O primeiro, responsável pela dinâmica unitária e sendo governado pelo operador hermitiano $H(t)$. Já o segundo termo representa uma dinâmica não unitária governada pelas taxas de decaimento $\gamma_k(t)$, representando assim a decoerência e dissipação que ocorre no sistema. Vale ressaltar que durante toda a dedução da Eq. (3.41), somente foram considerados os vínculos em que a evolução é necessariamente hermitiana e preserva o traço^f. Porém, nenhum vínculo sobre a positividade (P) ou completa positividade (CP) da dinâmica foi imposta, resultando no fato de que algumas evoluções do operador densidade regidas pela Eq. (3.41) não representam uma evolução de caráter físico^g. As condições necessárias para garantir que a dinâmica do sistema seja CP ainda é um problema em aberto (17), mas que já foi resolvido apenas em casos específicos, como por exemplo, para a dinâmica de um sistema de um qbit. (52)

Conforme a Eq. (3.15), como os operadores $\{F_i \mid i = 1, 2, \dots, d^2-1\}$ são ortonormais,

^eEstes coeficientes são chamados assim, pois descrevem o processo de perda das características quânticas do sistema devido sua interação com o reservatório/ambiente (decoerência).

^fTais vínculos impostos nos levam nas condições de que os coeficientes $\gamma_k(t)$ são reais e há conservação de probabilidade antes e depois da dinâmica.

^gNeste caso, podemos ter que os autovalores do operador densidade podem assumir valores negativos.

temos que os operadores $L_k(t)$ também obedecem tal condição

$$\begin{aligned}
\text{Tr}_S [L_k^\dagger(t)L_k(t)] &= \text{Tr}_S [L_k^\dagger(t)L_k(t)] \\
&= \text{Tr}_S \left[\sum_{j=1}^{d^2-1} u_{jk}^*(t)F_j^\dagger \sum_{i=1}^{d^2-1} u_{ik}(t)F_i \right] \\
&= \sum_{i,j=1}^{d^2-1} u_{jk}^*(t)u_{ik}(t)\text{Tr}_S(F_j^\dagger F_i) \\
&= \sum_{i=1}^{d^2-1} u_{ik}^*(t)u_{ik}(t) \\
&= \sum_{i=1}^{d^2-1} |u_{ik}(t)|^2 = 1,
\end{aligned} \tag{3.42}$$

pois $u_{ik}(t)$ são coeficientes de uma matriz unitária. Assim, os operadores $L_k(t)$ são ortogonais e obedecem a seguinte relação

$$\text{Tr}_S [L_k^\dagger(t)L_m(t)] = \delta_{km}. \tag{3.43}$$

Além disso, os operadores $L_k(t)$ também devem obedecer o vínculo imposto na Eq. (3.17). Assim,

$$\begin{aligned}
\text{Tr}[L_k(t)] &= \text{Tr} \left[\sum_{i=1}^{d^2-1} u_{ik}(t)F_i \right] \\
&= \sum_{i=1}^{d^2-1} u_{ik}(t)\text{Tr}(F_i) = 0.
\end{aligned} \tag{3.44}$$

3.3 Método de Nakajima-Zwanzig

A dinâmica de um sistema quântico aberto geralmente requer um processo de extensão do sistema e o ambiente em um sistema global fechado, na qual aplica-se a dinâmica neste sistema global e depois elimina-se as variáveis do sistema indesejado. (3) Geralmente algum destes sistemas quânticos estão fora do nosso controle e possuem infinitos graus de liberdade, fazendo com que o uso do formalismo de operador soma seja difícil de ser empregado na prática. (3)

Assim, outras técnicas se mostram úteis neste cenário descrito. O objetivo desta seção é apresentar a dedução da equação mestra utilizando o método de Nakajima-Zwanzig, na qual se fundamenta no uso da técnica de projetores. (2, 53, 54) Os resultados aqui apresentados se baseiam nas Refs. (2, 3, 55) A equação mestra pode ser obtida ainda utilizando outras técnicas como a *time-convolutionless* e o modelo *integro-differential*. (2, 3)

Assim, considere um sistema quântico geral representado pelo seguinte Hamiltoniano

$$H = H_S + H_R + H_{SR}, \tag{3.45}$$

onde os termos H_S , H_R e H_{SR} , representam os Hamiltonianos do sistema S , do reservatório R e da interação entre ambos, respectivamente. Pode-se ainda escrever o Hamiltoniano de interação da seguinte forma

$$H_{SR} = \sum_n A_n \otimes B_n, \quad (3.46)$$

em que A_n e B_n representam operadores hermitianos atuando no espaço de Hilbert do sistema \mathcal{H}_S e do reservatório \mathcal{H}_R .

O próximo passo consiste em calcular a evolução temporal do sistema total, usando o formalismo do operador densidade. Escrevendo a equação de Liouville-von Neumann (2)

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i [H(t), \rho]. \quad (3.47)$$

Como o operador evolução temporal $U(t, t_0) = e^{-i(H_S+H_R)(t-t_0)}$ e devido ao fato dele ser unitário, ele somente aplica uma rotação no espaço de Hilbert em questão. Desta maneira, pode-se desconsiderar os Hamiltonianos do sistema e do reservatório, focando-se apenas no termo de interação H_{SR} , isto é, no Hamiltoniano responsável pela troca de informações entre o sistema e o reservatório. Escrevendo a equação de Liouville-von Neumann para o operador densidade total na representação de interação, denotado por $\tilde{\rho}_{SR}$, temos

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_{SR}(t) = -i [\tilde{H}_{SR}(t), \tilde{\rho}_{SR}], \quad (3.48)$$

em que os termos acima são definidos como

$$\tilde{\rho}_{SR}(t) = U^\dagger(t, 0)\rho_{SR}U(t, 0), \quad (3.49)$$

$$\tilde{H}(t) = U^\dagger(t, 0)H_{SR}U(t, 0) = \sum_n \tilde{A}_n(t) \otimes \tilde{B}_n(t), \quad (3.50)$$

$$U(t, 0) = e^{-i(H_S+H_R)t}, \quad (3.51)$$

$$\tilde{A}_n(t) = e^{iH_S t} A_n e^{-iH_S t}, \quad (3.52)$$

$$\tilde{B}_n(t) = e^{iH_R t} B_n e^{-iH_R t}. \quad (3.53)$$

Para a dedução da equação mestra nesta seção, vamos utilizar a técnica desenvolvida por Nakajima (53) e Zwanzig (54) que se baseia no uso de projetores ortogonais, também explicada nas Refs. (2, 56, 57) Assim, podemos definir dois projetores ortogonais P e Q ,

$$P\rho_{SR} \equiv \text{Tr}_R(\rho_{SR}) \otimes \rho_R, \quad (3.54)$$

$$Q\rho_{SR} \equiv (1 - P)\rho_{SR}, \quad (3.55)$$

em que $\rho_{SR} \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_R$ representa o estado conjunto do sistema quântico e o reservatório, e $\rho_R \in \mathcal{H}_R$ é um estado fixo do reservatório. Observe que o termo referente ao projetor P foi construído de forma a eliminar as correlações entre o sistema e o reservatório, enquanto o termo proporcional a Q contém toda a correlações do ambiente. Devido a

construção dos projetores, tem-se que eles satisfazem as seguintes propriedades

$$P + Q = \mathbf{1}, \quad (3.56)$$

$$P^2 = P, \quad (3.57)$$

$$Q^2 = Q, \quad (3.58)$$

$$PQ = 0, \quad (3.59)$$

$$QP = 0. \quad (3.60)$$

Adicionalmente, assumiremos que os estados do reservatório estão inicialmente em um equilíbrio térmico, sendo assim, descritos pelo ensemble de Gibbs

$$\rho_R = \frac{e^{-\beta H_R}}{Z}, \quad Z = \text{Tr}_R \left(e^{-\beta H_R} \right), \quad (3.61)$$

sendo $\beta = 1/T^{\text{h}}$. Utilizando então as Eqs. (3.54) e (3.55) para determinar a evolução do sistema total e aplicando-se os projetores P e Q na Eq. (3.48), temos

$$\frac{d}{dt} P \tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) = -iP \left[\tilde{H}(t), \tilde{\rho}_{\text{SR}} \right], \quad (3.62)$$

$$\frac{d}{dt} Q \tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) = -iQ \left[\tilde{H}(t), \tilde{\rho}_{\text{SR}} \right]. \quad (3.63)$$

Usando a definição do comutador e inserindo a identidade $P + Q = \mathbf{1}$ entre os termos \tilde{H} e $\tilde{\rho}_{\text{SR}}$, as Eqs. (3.62) e (3.63) tornam-se

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P \tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) &= -iP \tilde{H}(P + Q) \tilde{\rho}_{\text{SR}} + iP \tilde{\rho}_{\text{SR}}(P + Q) \tilde{H} \\ &= iP \left[\tilde{H}, P \tilde{\rho}_{\text{SR}} \right] + iP \left[\tilde{H}, Q \tilde{\rho}_{\text{SR}} \right] \\ &= P \nu(t) P \tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) + P \nu(t) Q \tilde{\rho}_{\text{SR}}(t), \end{aligned} \quad (3.64)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} Q \tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) &= -iQ \tilde{H}(P + Q) \tilde{\rho}_{\text{SR}} + iQ \tilde{\rho}_{\text{SR}}(P + Q) \tilde{H} \\ &= iQ \left[\tilde{H}, P \tilde{\rho}_{\text{SR}} \right] + iQ \left[\tilde{H}, Q \tilde{\rho}_{\text{SR}} \right] \\ &= Q \nu(t) P \tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) + Q \nu(t) Q \tilde{\rho}_{\text{SR}}(t), \end{aligned} \quad (3.65)$$

onde foi usado a definição $\nu(t)(\bullet) \equiv -i \left[\tilde{H}(t), \bullet \right]$. Para os cálculos da equação mestra, utilizaremos a hipótese de que $\text{Tr}_R \left[\tilde{H}(t) \tilde{\rho}_R(t) \right] = 0$. Para entendermos melhor o real significado desta hipótese, vamos calcular explicitamente o termo em questão

$$\begin{aligned} \text{Tr}_R \left[\tilde{H}(t) \tilde{\rho}_R(t) \right] &= \text{Tr}_R \left[e^{i(H_S + H_R)t} H_{\text{SR}} e^{-i(H_S + H_R)t} e^{iH_R t} \rho_R e^{-iH_R t} \right] \\ &= e^{iH_S t} e^{-iH_S t} \text{Tr}_R \left[e^{iH_R t} H_{\text{SR}} e^{-iH_R t} e^{iH_R t} \rho_R e^{-iH_R t} \right] \\ &= \text{Tr}_R \left[e^{iH_R t} H_{\text{SR}} \rho_R e^{-iH_R t} \right] \\ &= \text{Tr}_R (H_{\text{SR}} \rho_R) \\ &= \sum_n \text{Tr}_R (A_n \otimes B_n \rho_R) \\ &= \sum_n A_n \langle B_n \rangle. \end{aligned} \quad (3.66)$$

^hNo caso adotamos que a constante de Boltzmann é $K_B = 1$

Isto significa que ao utilizar a hipótese acima estaremos apenas fazendo um deslocamento na energia do reservatório e definindo um novo estado fundamental em relação a sua energia média (58, 59), $\langle B_n \rangle$, pois podemos definir o Hamiltoniano de interação, H_{SR} , da seguinte forma

$$H_{\text{SR}} = \sum_n A_n \otimes (B_n - \langle B_n \rangle). \quad (3.67)$$

Nosso próximo passo consiste em calcular os termos da Eq. (3.64), logo o primeiro termo do lado direito é

$$\begin{aligned} P\nu(t)P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) &= -iP[\tilde{H}, P\tilde{\rho}_{\text{SR}}] \\ &= -i\text{Tr}_R[\tilde{H}, \tilde{\rho}_S(t) \otimes \rho_R] \otimes \rho_R \\ &= -i\left[\underbrace{\text{Tr}_R(\tilde{H}(t)\tilde{\rho}_R)}_{=0}, \tilde{\rho}(t)\right] \otimes \rho_R = 0, \end{aligned} \quad (3.68)$$

em que foram usadas as definições de $\nu(t)$ e do projetor P , conforme definidos acima. Analogamente para o segundo termo do lado direito da Eq. (3.65)

$$Q\nu(t)Q\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) = 0. \quad (3.69)$$

Desta maneira as Eqs. (3.64) e (3.65) tornam-seⁱ

$$\frac{d}{dt}P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) = P\nu(t)Q\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t), \quad (3.71)$$

$$\frac{d}{dt}Q\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) = Q\nu(t)P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t). \quad (3.72)$$

Resolvendo as equações diferenciais acima, obtemos^j

$$P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) = P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(0) + \int_0^t ds P\nu(s)Q\tilde{\rho}_{\text{SR}}(s), \quad (3.73)$$

$$Q\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) = \mathcal{G}(t, 0)Q\tilde{\rho}_{\text{SR}}(0) + \int_0^t ds \mathcal{G}(t, s)Q\nu(s)P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(s), \quad (3.74)$$

onde $\mathcal{G}(t, s) = Te^{\int_s^t dt' Q\nu(t')}$. Assim, substituindo a Eq. (3.74) na Eq. (3.73), temos

$$\begin{aligned} P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) &= P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(0) + \int_0^t ds P\nu(s)\mathcal{G}(s, 0)Q\tilde{\rho}_{\text{SR}}(0) \\ &\quad + \int_0^t ds \int_0^s du P\nu(s)\mathcal{G}(s, u)Q\nu(u)P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(u). \end{aligned} \quad (3.75)$$

ⁱConsiderando que os estados do reservatório sejam estacionários e como $P\rho_{\text{SR}} \equiv \text{Tr}_R(\rho_{\text{SR}}) \otimes \rho_R$, temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t)] &= \frac{d}{dt}\{\text{Tr}_R[\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t)] \otimes \tilde{\rho}_R\} = \frac{d}{dt}\{\text{Tr}_R[\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t)]\} \otimes \tilde{\rho}_R + \text{Tr}_R[\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t)] \otimes \underbrace{\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_R}_{=0} \\ &= \text{Tr}_R\left[\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t)\right] \otimes \tilde{\rho}_R = P\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t). \end{aligned} \quad (3.70)$$

^jPara resolver a segunda equação diferencial da Eq. (3.72) foi usado o método de variação dos parâmetros. (60, 61) Veja o apêndice A para maiores detalhes.

Além disso, vamos supor que o estado inicial do sistema é $\rho_{\text{SR}}(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_R$, pois assim garantimos que a dinâmica do sistema é CPTP. (3) Assim, calculando o segundo termo do lado direito da Eq. (3.75)

$$\begin{aligned}
Q\tilde{\rho}_{\text{SR}}(0) &= (1 - P)\tilde{\rho}_{\text{SR}}(0) = \tilde{\rho}_S(0) \otimes \tilde{\rho}_R - P\tilde{\rho}_{\text{SR}} \\
&= \tilde{\rho}_S(0) \otimes \tilde{\rho}_R - \text{Tr}_R[\tilde{\rho}_{\text{SR}}(0)] \otimes \tilde{\rho}_R \\
&= \tilde{\rho}_S(0) \otimes \tilde{\rho}_R - \text{Tr}_R[\tilde{\rho}_S(0) \otimes \tilde{\rho}_R] \otimes \tilde{\rho}_R \\
&= \tilde{\rho}_S(0) \otimes \tilde{\rho}_R - \{\text{Tr}_R[\tilde{\rho}_S(0)] \text{Tr}_R(\tilde{\rho}_R)\} \otimes \rho_R \\
&= \tilde{\rho}_S(0) \otimes \tilde{\rho}_R - \tilde{\rho}_S(0) \otimes \tilde{\rho}_R = 0.
\end{aligned} \tag{3.76}$$

A Eq. (3.75) então assume a seguinte forma

$$P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) = P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(0) + \int_0^t ds \int_0^s du \mathcal{K}(u, s) P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(u), \tag{3.77}$$

em que

$$\mathcal{K}(u, s) = P\nu(s)\mathcal{G}(s, u)Q\nu(u), \tag{3.78}$$

é chamado de kernel de memória. (3) Entretanto, algumas considerações devem ser feitas sobre o kernel para que a Eq. (3.77) obedeça a forma geral de uma equação mestra, conforme apresentada na Eq. (3.41). Definindo os tempos de variação τ_S e τ_R , que representam o tempo característico de relaxação do sistema S e o tempo em que as funções de correlação do reservatório decaem, respectivamente. Isto implica que o tempo de variação τ_S de $\rho_{\text{SR}}(t)$ deve ser muito maior que o tempo de variação τ_R , que mostra a taxa com que o $\mathcal{K}(u, s)$ decai quando $|u - s| \gg 1$. (3) Ao considerarmos tal regime de escala temporal, estamos intrinsecamente fazendo algumas suposições sobre o tamanho do reservatório e sua força de acoplamento com o sistema quântico. (3) Este fato se torna importante, pois tais condições podem não garantir que a Eq. (3.77) obedeça a forma geral da Eq. (3.41). (3) Diversos trabalhos foram realizados (62–66) na qual estudou-se dois casos limites em que $\tau_S/\tau_R \rightarrow \infty$, que são

1. **O limite de acoplamento fraco:** Neste caso podemos considerar que a interação entre o sistema e o reservatório é pequena, de modo que $H_{\text{SR}} \rightarrow gH_{\text{SR}}$ e o parâmetro g modula a força de acoplamento. Assim, para g pequeno, $\rho_{\text{SR}}(t)$ varia de forma lenta e no limite em que $g \rightarrow 0$, temos que $\tau_S \rightarrow \infty$ e conseqüentemente $\tau_S/\tau_R \rightarrow \infty$ para cada τ_R fixo.
2. **O limite de acoplamento singular:** Este caso corresponde quando $\tau_R \rightarrow 0$, fazendo com que o kernel $\mathcal{K}(u, s)$ se comporte como uma função delta.

Ambos os casos mencionados acima serão abordados de maneira mais detalhada ao longo da dedução da equação mestra presente nesta seção, de modo que o leitor possa identificar melhor como estas condições se aplicam.

Dando prosseguimento à dedução da equação mestra, vamos reescrever de forma explícita a Eq. (3.77), pois assim podemos prosseguir de uma maneira mais didática para o leitor. Assim sendo,

$$P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) = P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(0) + \int_0^t ds \int_0^s du P\nu(s)\mathcal{G}(s,u)Q\nu(u)P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(u), \quad (3.79)$$

sendo o kernel definido como $\mathcal{K}(u,s) = P\nu(s)\mathcal{G}(s,u)Q\nu(u)$. Como $\tilde{U}(s,u)$ é dado pela série de Dyson (3),

$$\begin{aligned} \tilde{U}(s,u) &= T e^{-i \int_u^s dt' \tilde{H}(t')} \\ &= \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_u^s dt_1 \int_u^{t_1} dt_2 \dots \int_u^{t_{n-1}} dt_n \tilde{H}(t_1) \tilde{H}(t_2) \dots \tilde{H}(t_n), \end{aligned} \quad (3.80)$$

em que temos a seguinte relação de ordem temporal $t_1 > t_2 > \dots > t_n$. Desta forma, o operador densidade na representação de interação é escrito como

$$\tilde{\rho}_{\text{SR}}(s) = \tilde{U}(s,u)\tilde{\rho}_{\text{SR}}(u)\tilde{U}^\dagger(s,u), \quad (3.81)$$

e invertendo o termo para obtermos a relação de $\tilde{\rho}_{\text{SR}}(u)$

$$\tilde{\rho}_{\text{SR}}(u) = \tilde{U}^\dagger(u,s)\tilde{\rho}_{\text{SR}}(s)\tilde{U}(u,s). \quad (3.82)$$

Aplicando a definição acima no segundo termo do lado direito da Eq. (3.79), temos

$$P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) = P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(0) + \int_0^t ds \int_0^s du P\nu(s)\mathcal{G}(s,u)Q\nu(u) \left[\tilde{U}^\dagger(u,s)\tilde{\rho}_{\text{SR}}(s)\tilde{U}(u,s) \right]. \quad (3.83)$$

Aplicando a expansão de Baker–Campbell–Hausdorff^k (67)

$$\begin{aligned} \tilde{U}^\dagger(u,s)\tilde{\rho}_{\text{SR}}(s)\tilde{U}(u,s) &= \left[\mathcal{T} e^{-i \int_u^s dt' \tilde{H}(t')} \right]^\dagger \tilde{\rho}_{\text{SR}} \left[\mathcal{T} e^{-i \int_u^s dt' \tilde{H}(t')} \right] \\ &= \left[\mathcal{T}^* e^{i \int_u^s dt' \tilde{H}(t')} \right] \tilde{\rho}_{\text{SR}} \left[\mathcal{T} e^{-i \int_u^s dt' \tilde{H}(t')} \right] \\ &= \tilde{\rho}_{\text{SR}}(s), \end{aligned} \quad (3.84)$$

em que \mathcal{T}^* representa o ordenamento temporal inverso $t_1 < t_2 < \dots < t_n$ e $[\tilde{H}(t), \tilde{\rho}(t)] = 0$.

A definição do propagador $\mathcal{G}(s,u)$

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(t,s) &= T e^{\int_u^s dt' Q\nu(t')} \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_u^s dt_1 \int_u^{t_1} dt_2 \dots \int_u^{t_{n-1}} dt_n Q\nu(t_1)Q\nu(t_2) \dots Q\nu(t_n). \end{aligned} \quad (3.85)$$

Substituindo as Eqs. (3.84) e (3.85) em (3.83),

$$\begin{aligned} P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) &= P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(0) \\ &+ \int_0^t ds \int_0^s du P\nu(s) \left[1 + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_u^s dt_1 \int_u^{t_1} dt_2 \dots \times \right. \\ &\left. \times \dots \int_u^{t_{n-1}} dt_n Q\nu(t_1)Q\nu(t_2) \dots Q\nu(t_n)Q\nu(u) \right] \tilde{\rho}_{\text{SR}}(s). \end{aligned} \quad (3.86)$$

^kA expansão de Baker–Campbell–Hausdorff é definida como: $e^X A e^{-X} = A + [X, A] + \frac{1}{2!} [X, [X, A]] + \dots$

3.3.1 A aproximação de Born: acoplamento fraco

Conforme discutido anteriormente, ao considerarmos o regime de acoplamento fraco temos que a variação do estado $\tilde{\rho}_{\text{SR}}(u)$ é desprezível perante a escala de tempo do reservatório τ_R . (3) Isto nos mostra que os efeitos de memória da dinâmica são insignificantes e a evolução resultante é tida como local no tempo, isto é, $\rho_{\text{SR}}(t)$ só depende do estado atual e não de estados passados. Fisicamente isto representa que devido a interação ser fraca, toda a dinâmica do sistema conjunto (sistema quântico e reservatório) permanece descorrelacionada, já que conforme apresentado acima, o estado inicial era um estado do tipo $\rho_{\text{SR}}(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_R$. (2,5)

O próximo passo é definir um parâmetro adimensional, g , que é responsável pelo controle da intensidade da interação entre o sistema e o reservatório. Sendo assim, este parâmetro deve ser introduzido no Hamiltoniano, $\tilde{H}(t) \rightarrow g\tilde{H}(t)$ e conseqüentemente, $\nu(t) \rightarrow g\nu(t)$. Como estamos considerando o regime de acoplamento fraco para a dedução da equação mestra, será mantido o termo de segunda ordem em g , descartando os termos de ordens superiores

$$P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) = P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(0) + g^2 \int_0^t ds \int_0^s du P\nu(s)Q\nu(u)\tilde{\rho}_{\text{SR}}(s) + \mathcal{O}(g^3). \quad (3.87)$$

Aplicando as definições $Q = 1 - P$ e $P\nu(s)P = 0$ e fazendo a transformação de variável $u \rightarrow s - u$, a Eq. (3.87) pode ser reescrita da seguinte maneira

$$\begin{aligned} P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) &= P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(0) - g^2 \int_0^t ds \int_0^s du P\nu(s)(1 - P)\nu(s - u)\tilde{\rho}_{\text{SR}}(s) + \mathcal{O}(g^3) \\ &= P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(0) \\ &\quad - g^2 \int_0^t ds \int_0^s du \left[P\nu(s)\nu(s - u)\tilde{\rho}_{\text{SR}}(s) - \underbrace{P\nu(s)P\nu(s - u)}_{=0}\tilde{\rho}_{\text{SR}}(s) \right] + \mathcal{O}(g^3) \\ &= P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(0) - g^2 \int_0^t ds \int_0^s du P\nu(s)\nu(s - u)\tilde{\rho}_{\text{SR}}(s) + \mathcal{O}(g^3). \end{aligned} \quad (3.88)$$

Substituindo as definições $P\rho_{\text{SR}}(t) \equiv \text{Tr}[\rho_{\text{SR}}(t)] \otimes \rho_R$ e $\nu(t)(\bullet) \equiv -i[\tilde{H}(t), \bullet]$, podemos calcular os termos pertencentes a Eq. (3.88)

1. $P\nu(s) = \text{Tr}_R[\nu(s)] \otimes \rho_R = i\text{Tr}_R[\tilde{H}(s), \tilde{\rho}_{\text{SR}}(s)] \otimes \rho_R$,
2. $\nu(s - u)\tilde{\rho}_{\text{SR}}(s) = i[\tilde{H}(s - u), \tilde{\rho}_{\text{SR}}(s)]$,
3. $P\tilde{\rho}_{\text{SR}}(0) = \text{Tr}_R[\tilde{\rho}_{\text{SR}}(0)] \otimes \rho_R$.

Aplicando as definições acima e tomando o traço parcial em relação as variáveis do reservatório, os termos independentes da integral da Eq. (3.88) são reescritos na forma

1. $\text{Tr}_R\{\text{Tr}_R[\tilde{\rho}_{\text{SR}}(t)] \otimes \rho_R\} = \text{Tr}_R[\tilde{\rho}_S(t) \otimes \rho_R] = \tilde{\rho}_S(t)$,
2. $\text{Tr}_R\{\text{Tr}_R[\tilde{\rho}_{\text{SR}}(0)] \otimes \rho_R\} = \tilde{\rho}_S(0)$.

Desta maneira, estamos aptos a construir a dinâmica do operador densidade referente ao sistema. A Eq. (3.88) então se torna

$$\begin{aligned}
\tilde{\rho}(t) &= \tilde{\rho}(0) + \text{Tr}_R \left\{ g^2 \int_0^t ds \int_0^s du \text{Tr}_R \left[\tilde{H}(s), \tilde{\rho}_{\text{SR}}(s) \right] \otimes \rho_R \left[\tilde{H}(s-u), \tilde{\rho}_{\text{SR}}(s) \right] \right\} + \mathcal{O}(g^3) \\
&= \tilde{\rho}(0) + g^2 \text{Tr}_R \left\{ \int_0^t ds \int_0^s du \text{Tr}_R \left[\tilde{H}(s), \tilde{\rho}_{\text{SR}}(s) \right] \left[\tilde{H}(s-u), \tilde{\rho}_{\text{SR}}(s) \right] \otimes \rho_R \right\} + \mathcal{O}(g^3) \\
&= \tilde{\rho}(0) + g^2 \text{Tr}_R \left\{ \int_0^t ds \int_0^s du \text{Tr}_R \left[\tilde{H}(s), \nu(s-u) \tilde{\rho}_{\text{SR}}(s) \right] \otimes \rho_R \right\} + \mathcal{O}(g^3) \\
&= \tilde{\rho}(0) + g^2 \int_0^t ds \int_0^s du \text{Tr}_R \left[\tilde{H}(s), \left[\tilde{H}(s-u), \tilde{\rho}(s) \otimes \rho_R \right] \right] + \mathcal{O}(g^3), \tag{3.89}
\end{aligned}$$

em que para não sobrecarregar a notação foi retirado o subíndice S do operador densidade, porém vamos manter em mente que o termo $\rho(t)$ é referente ao sistema quântico S . Assumindo que o espectro de energia do sistema é discreto, ou seja,

$$H_S = \sum_{\epsilon} \epsilon \Pi(\epsilon), \tag{3.90}$$

onde ϵ são os autovalores do Hamiltoniano H_S e $\Pi(\epsilon)$ os projetores correspondentes a cada subespaço. Aplicando-se a definição do espectro de energia em um operador na representação de interação

$$\begin{aligned}
\tilde{A}_{\alpha}(t) &= e^{iH_S t} A_{\alpha} e^{-iH_S t} \\
&= e^{i \sum_{\epsilon} \epsilon \Pi(\epsilon) t} A_{\alpha} e^{-i \sum_{\epsilon'} \epsilon' \Pi(\epsilon') t} \\
&= \sum_{\epsilon} e^{i \epsilon t} \Pi(\epsilon) A_{\alpha} \sum_{\epsilon'} e^{-i \epsilon' t} \Pi(\epsilon') \\
&= \sum_{\epsilon, \epsilon'} e^{-i(\epsilon' - \epsilon) t} \Pi(\epsilon) A_{\alpha} \Pi(\epsilon'), \tag{3.91}
\end{aligned}$$

Definindo $\omega = \epsilon' - \epsilon$ e usando que

$$\Pi(\epsilon') = \sum_{\omega} \delta_{\epsilon', \epsilon + \omega} \Pi(\epsilon'), \tag{3.92}$$

a Eq. (3.91) se torna

$$\begin{aligned}
\tilde{A}_{\alpha}(t) &= \sum_{\epsilon, \epsilon'} e^{-i(\epsilon' - \epsilon) t} \Pi(\epsilon) A_{\alpha} \sum_{\omega} \delta_{\epsilon', \epsilon + \omega} \Pi(\epsilon') \\
&= \sum_{\omega} e^{-i \omega t} \sum_{\epsilon, \epsilon'} \delta_{\epsilon', \epsilon + \omega} \Pi(\epsilon) A_{\alpha} \Pi(\epsilon') \\
&= \sum_{\omega} e^{-i \omega t} \sum_{\epsilon' - \epsilon = \omega} \Pi(\epsilon) A_{\alpha} \Pi(\epsilon') \\
&\equiv \sum_{\omega} e^{-i \omega t} A_{\alpha}(\omega), \tag{3.93}
\end{aligned}$$

onde definimos o operador $A_{\alpha}(\omega)$ como

$$A_{\alpha}(\omega) = \sum_{\epsilon' - \epsilon = \omega} \Pi(\epsilon) A_{\alpha} \Pi(\epsilon'). \tag{3.94}$$

Tomando seu complexo conjugado e tendo em mente que A_α é um operador hermitiano, obtemos a seguinte propriedade

$$\begin{aligned} A_\alpha^\dagger(\omega) &= \sum_{\epsilon' - \epsilon = \omega} \Pi(\epsilon') A_\alpha^\dagger \Pi(\epsilon) \\ &= \sum_{\epsilon' - \epsilon = \omega} \Pi(\epsilon') A_\alpha \Pi(\epsilon) \\ &= \sum_{\epsilon' - \epsilon = \omega} \Pi(\epsilon) A_\alpha \Pi(\epsilon') = A_\alpha^\dagger(-\omega). \end{aligned} \quad (3.95)$$

Então podemos escrever $\tilde{A}_\alpha(t)$ utilizando os operadores $A_\alpha(\omega)$ como

$$\tilde{A}_\alpha(t) = \sum_{\omega} e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega) \quad (3.96)$$

$$= \sum_{\omega} e^{i\omega t} A_\alpha^\dagger(\omega) \quad (3.97)$$

Desta maneira, usando a Eq. (3.96) pode-se reescrever o Hamiltoniano do sistema da seguinte forma

$$\begin{aligned} \tilde{H}(t) &= \sum_{\alpha} \tilde{A}_\alpha(t) \otimes \tilde{B}_\alpha(t) \\ &= \sum_{\omega, \alpha} e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega) \otimes \tilde{B}_\alpha(t) \\ &= \sum_{\omega, \alpha} e^{i\omega t} A_\alpha^\dagger(\omega) \otimes \tilde{B}_\alpha^\dagger(t). \end{aligned} \quad (3.98)$$

Sendo assim, usando a Eq. (3.98) escrevemos os termos $\tilde{H}(s-u)$ e $\tilde{H}(s)$ presentes na Eq. (3.89)

$$\tilde{H}(s-u) = \sum_{\omega, \alpha} e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega) \otimes \tilde{B}_\alpha(s-u), \quad (3.99)$$

$$\tilde{H}(s) = \sum_{\omega, \alpha} e^{i\omega t} A_\alpha^\dagger(\omega) \otimes \tilde{B}_\alpha^\dagger(s). \quad (3.100)$$

Os Hamiltonianos foram reescritos desta forma, pois assim sabemos operar seus comutadores conforme mostrado acima. A Eq. (3.89) se torna

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(t) &= \tilde{\rho}(0) + g^2 \int_0^t ds \int_0^s du \text{Tr}_R \left[\tilde{H}(s), \left[\tilde{H}(s-u), \tilde{\rho}(s) \otimes \rho_R \right] \right] + \mathcal{O}(g^3) \\ &= \tilde{\rho}(0) + g^2 \int_0^t ds \int_0^s du \text{Tr}_R \left[\sum_{\omega, \alpha} e^{i\omega s} A_\alpha^\dagger(\omega) \otimes \tilde{B}_\alpha^\dagger(s-u), \times \right. \\ &\quad \left. \times \left[\sum_{\omega', \beta} e^{-i\omega' s} A_\beta(\omega') \otimes \tilde{B}_\beta(s-u), \tilde{\rho}(s) \otimes \rho_R \right] \right] + \mathcal{O}(g^3) \\ &= \tilde{\rho}(0) + g^2 \int_0^t ds \int_0^s du \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega - \omega')s} \text{Tr}_R \left[A_\alpha^\dagger(\omega) \otimes \tilde{B}_\alpha^\dagger(s-u), \times \right. \\ &\quad \left. \times \left[A_\beta(\omega') \otimes \tilde{B}_\beta(s-u), \tilde{\rho}(s) \otimes \rho_R \right] \right] + \mathcal{O}(g^3) \\ &= \tilde{\rho}(0) + g^2 \int_0^t ds \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega - \omega')s} \Gamma_{\alpha\beta}^s(\omega) \left[A_\beta(\omega) \tilde{\rho}(s), A_\alpha^\dagger(\omega') \right] \\ &\quad + g^2 \int_0^t ds \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega' - \omega)s} \Gamma_{\beta\alpha}^{s*}(\omega) \left[A_\beta(\omega'), \tilde{\rho}(s) A_\alpha^\dagger(\omega') \right] + \mathcal{O}(g^3), \end{aligned} \quad (3.101)$$

onde definimos as correlações como

$$\Gamma_{\alpha\beta}^s(\omega) = \int_0^s du e^{i\omega u} \text{Tr}_R \left[\tilde{B}_\alpha(s) \tilde{B}_\beta(s-u) \rho_R \right] \quad (3.102)$$

$$\Gamma_{\beta\alpha}^{s*}(\omega) = \int_0^s du e^{-i\omega u} \text{Tr}_R \left[\tilde{B}_\beta^*(s) \tilde{B}_\alpha^*(s-u) \rho_R \right]. \quad (3.103)$$

Lembrando que o Hamiltoniano H_R somente atua no espaço de Hilbert do reservatório, pode-se calcular explicitamente o traço das correlações

$$\begin{aligned} \Gamma_{\alpha\beta}^s(\omega) &= \int_0^s du e^{i\omega u} \text{Tr}_R \left[\tilde{B}_\alpha(s) \tilde{B}_\beta(s-u) \rho_R \right] \\ &= \int_0^s du e^{i\omega u} \text{Tr}_R \left[e^{iH_R s} \tilde{B}_\alpha(0) e^{-iH_R s} e^{iH_R(s-u)} \tilde{B}_\beta(0) e^{-iH_R(s-u)} \rho_R \right] \\ &= \int_0^s du e^{i\omega u} \text{Tr}_R \left[\tilde{B}_\alpha(u) B_\beta(0) \rho_R \right], \end{aligned} \quad (3.104)$$

em que na última passagem utilizamos o fato de que ρ_R comuta com $e^{iH_R t}$

Deve-se agora introduzir o parâmetro de acoplamento na escala temporal de modo a reescalar o tempo presente na dinâmica do operador densidade do sistema. Assim, temos que $\tau = g^2 t$ e $\sigma = g^2 s$, onde τ representa a escala de tempo do sistema devido as suas interações com o reservatório. A Eq. (3.101) fica

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(\tau/g^2) &= \tilde{\rho}(0) + \int_0^\tau d\sigma \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega - \omega')\sigma/g^2} \Gamma_{\alpha\beta}^{\sigma/g^2}(\omega) \left[A_\beta(\omega) \tilde{\rho}(\sigma/g^2), A_\alpha^\dagger(\omega') \right] \\ &\quad + \int_0^\tau d\sigma \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega' - \omega)\sigma/g^2} \Gamma_{\beta\alpha}^{\sigma/g^2*}(\omega) \left[A_\beta(\omega'), \tilde{\rho}(\sigma/g^2) A_\alpha^\dagger(\omega) \right] + \mathcal{O}(g). \end{aligned} \quad (3.105)$$

Tomando o limite de acoplamento fraco, $g \rightarrow 0$, vemos que a escala de variação do operador $\tilde{\rho}(\tau/g^2)$ é τ , pois a dependência de g^2 com $\tilde{\rho}(\tau/g^2)$ entra somente no Hamiltoniano livre (sistema mais banho, sem considerar a interação) que foi retirado ao passarmos para a representação de interação. (3) Assim, definindo a grandeza $\tilde{\rho}(\tau) \equiv \lim_{g \rightarrow 0} \tilde{\rho}(\tau/g^2)$, o erro relativo presente na equação acima vai a zero, ou seja, $\mathcal{O}(g) \rightarrow 0$. Assim,

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(\tau) &= \tilde{\rho}(0) + \lim_{g \rightarrow 0} \int_0^\tau d\sigma \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega - \omega')\sigma/g^2} \Gamma_{\alpha\beta}^{\sigma/g^2}(\omega) \left[A_\beta(\omega) \tilde{\rho}(\sigma/g^2), A_\alpha^\dagger(\omega') \right] \\ &\quad + \lim_{g \rightarrow 0} \int_0^\tau d\sigma \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega' - \omega)\sigma/g^2} \Gamma_{\beta\alpha}^{\sigma/g^2*}(\omega) \left[A_\beta(\omega'), \tilde{\rho}(\sigma/g^2) A_\alpha^\dagger(\omega) \right]. \end{aligned} \quad (3.106)$$

3.3.2 Aproximação secular

Nesta seção será apresentada o limite da aproximação secular, outra consideração que é introduzida para a dedução na equação mestra, na qual no limite de acoplamento fraco os termos oscilantes presentes na Eq. (3.106) para com frequências diferentes são nulos. Este fato será melhor apresentado durante esta seção.

Proposição 1 (Lema de Riemann-Lebesgue) *Seja uma função $f(t)$ integrável no intervalo $[a, b]$, então*

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \int_a^b dt e^{izt} f(t) = 0. \quad (3.107)$$

O leitor mais interessado pode verificar a prova da proposição na Ref. (3)

Utilizando o lema de Riemman-Lebesgue (3), podemos observar que os termos oscilantes $e^{i(\omega-\omega')\sigma/g^2}$ para $\omega \neq \omega'$ vão a zero no regime em que $g \rightarrow 0$. Esta aproximação é conhecida como aproximação secular (2), conhecida como aproximação de onda girante no contexto de óptica quântica. (2, 57, 59, 68, 69) Assim sendo, os termos oscilantes para $\omega = \omega'$ se tornam

$$\sum_{\omega, \omega'} e^{i(\omega-\omega')\sigma/g^2} \Gamma_{\alpha\beta}^{\sigma/g^2}(\omega) [A_\beta(\omega)\tilde{\rho}(\sigma/g^2), A_\alpha^\dagger(\omega')] = \sum_{\omega} \Gamma_{\alpha\beta}^{\sigma/g^2}(\omega) [A_\beta(\omega)\tilde{\rho}(\sigma/g^2), A_\alpha^\dagger(\omega)]. \quad (3.108)$$

Desta maneira, a Eq. (3.106) é escrita como¹

$$\tilde{\rho}(\tau) = \tilde{\rho}(0) + \int_0^\tau d\sigma \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \left\{ \Gamma_{\alpha\beta}^\infty(\omega) [A_\beta(\omega)\tilde{\rho}(\sigma), A_\alpha^\dagger(\omega)] + \Gamma_{\beta\alpha}^{\infty*}(\omega) [A_\beta(\omega), \tilde{\rho}(\sigma)A_\alpha^\dagger(\omega)] \right\}. \quad (3.109)$$

Definindo o Lindbladiano como o segundo termo do lado direito da equação acima,

$$\mathcal{L}[\tilde{\rho}(\sigma)] \equiv \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \left\{ \Gamma_{\alpha\beta}^\infty(\omega) [A_\beta(\omega)\tilde{\rho}(\sigma), A_\alpha^\dagger(\omega)] + \Gamma_{\beta\alpha}^{\infty*}(\omega) [A_\beta(\omega), \tilde{\rho}(\sigma)A_\alpha^\dagger(\omega)] \right\}, \quad (3.110)$$

podemos reescrever a Eq. (3.109) como

$$\tilde{\rho}(\tau) = \rho(0) + \int_0^\tau d\sigma \mathcal{L}[\tilde{\rho}(\sigma)], \quad (3.111)$$

lembrando que a correlação é dada pela Eq. (3.104)

$$\Gamma_{\alpha\beta}^\infty(\omega) = \int_0^\infty du e^{i\omega u} \text{Tr}_R [\tilde{B}_\alpha(u)B_\beta(0)\rho_R], \quad (3.112)$$

3.3.3 Função de correlação

Todavia temos que a integral presente na Eq. (3.112) deve ser convergente. Para satisfazer essa condição, a função de correlação do reservatório deve decair com tempo u , isto é, $\text{Tr}_R [\tilde{B}_\alpha(u)B_\beta(0)\rho_R]$ deve decrescer conforme u aumenta. (3) Aplicando-se a mesma correspondência da Eq. (3.96) e (3.97) para os operadores $B_\alpha(u)$ do reservatório, temos

$$B_\alpha(u) = \sum_{\omega} e^{-i\omega u} B_\alpha(\omega) \quad (3.113)$$

$$= \sum_{\omega} e^{i\omega u} B_\alpha^\dagger(\omega). \quad (3.114)$$

Então a função de correlação do reservatório é

$$\text{Tr}_R [\tilde{B}_\alpha(u)B_\beta(0)\rho_R] = \sum_{\omega} e^{-i\omega u} \text{Tr}_R [\tilde{B}_\alpha(\omega)B_\beta(0)\rho_R], \quad (3.115)$$

¹Devido ao limite de acoplamento fraco $g \rightarrow 0$, a proporção presente na correlação $\sigma/g^2 \rightarrow \infty$ e seu limite superior da integral $s = \sigma/g^2 \rightarrow \infty$.

evidenciando que ela é periódica^m no tempo u e ao calcularmos a sua integral com o limite de integração tendendo ao infinito, teremos uma divergência. Para contornar este problema devemos tomar o limite do contínuo, assumindo assim que o reservatório R possui infinitos graus de liberdade, eliminando-se a periodicidade da Eq. (3.115), e consequentemente temos que seu espectro é contínuo. (3) Assim sendo,

$$\sum_{\omega} e^{-i\omega u} \text{Tr}_R [\tilde{B}_{\alpha}(\omega) B_{\beta}(0) \rho_R] \longrightarrow \int_{-a}^a d\omega J(\omega) e^{-i\omega u} \text{Tr}_R [\tilde{B}_{\alpha}(\omega) B_{\beta}(0) \rho_R], \quad (3.116)$$

em que $J(\omega)$ é a densidade de estados e a representa uma frequência de corte, podendo ser até mesmo infinita. Com isso, a função de correlação assume a forma

$$\text{Tr}_R [\tilde{B}_{\alpha}(u) B_{\beta}(0) \rho_R] = \int_{-a}^a d\omega J(\omega) e^{-i\omega u} \text{Tr}_R [\tilde{B}_{\alpha}(\omega) B_{\beta}(0) \rho_R], \quad (3.117)$$

sendo a Eq. (3.117) não mais periódica e aplicando o limite para $u \rightarrow \infty$

$$\lim_{u \rightarrow \infty} \text{Tr}_R [\tilde{B}_{\alpha}(u) B_{\beta}(0) \rho_R] = \lim_{u \rightarrow \infty} \int_{-a}^a d\omega J(\omega) e^{-i\omega u} \text{Tr}_R [\tilde{B}_{\alpha}(\omega) B_{\beta}(0) \rho_R] = 0, \quad (3.118)$$

em que foi usado o lema de Riemann-Lebesgue presente na proposição 1 e assumimos que a função dentro do traço é integrável no mesmo intervalo. Entretanto a condição de que o reservatório possua infinitos graus de liberdade não é suficiente para que a integral presente na Eq. (3.112) exista, pois o aspecto decrescente da função de correlação pode não ser rápido o suficiente. (3) O teorema a seguir nos apresenta uma condição suficiente para a existência desta integral (3)

Teorema 3 (Teorema de Davies) *Se existe um $\epsilon > 0$ tal que*

$$\int_0^{\infty} dt \left| \text{Tr}_R [\tilde{B}_{\alpha}(t) B_{\beta}(0) \rho_R] \right| (1-t)^{\epsilon} < \infty, \quad (3.119)$$

então o limite de acoplamento fraco é bem definido e

$$\lim_{g \rightarrow 0, \tau = g^2 t} \left\| \tilde{\mathcal{E}}_{(\tau, 0)} [\tilde{\rho}(0)] - e^{\mathcal{L}\tau} [\tilde{\rho}(0)] \right\|_1 = 0, \quad (3.120)$$

em que $\|X\|_1 = \text{Tr} \sqrt{X^{\dagger} X}$ e para toda condição inicial $\rho(0)$ e em todos os intervalos de tempo $[0, \tau_0]$, onde $\tilde{\mathcal{E}}_{(\tau, 0)}$ denota a dinâmica reduzida exata na representação de interação. (3)

A prova do teorema 3 pode ser encontrada nas Refs. (62, 63) Aplicando uma derivada temporal com relação ao tempo τ na Eq. (3.111), obtemos

$$\frac{d}{d\tau} \tilde{\rho}(\tau) = \mathcal{L}[\tilde{\rho}(\tau)] \Rightarrow \tilde{\rho}(\tau) = e^{\mathcal{L}\tau} [\tilde{\rho}(0)], \quad (3.121)$$

em que a dinâmica se torna exata a medida em que a constante de acoplamento $g \rightarrow 0$.

^mO mais correto seria dizer que a função correlação é quase-periódica, pois se os termos oscilantes forem incomensuráveis, não haverá periodicidade.

Devido a aplicação da aproximação secular, ela garante que o gerador \mathcal{L} apresenta a forma correta de uma equação mestra homogênea Markoviana. (3) Assim sendo, podemos reescrever a correlação $\Gamma_{\alpha\beta}^{\infty}(\omega)$ em um termo hermitiano e outro anti-hermitiano

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{\infty}(\omega) = \frac{1}{2}\gamma_{\alpha\beta}(\omega) + iS_{\alpha\beta}(\omega), \quad (3.122)$$

sendo os termos dados por

$$\gamma_{\alpha\beta}(\omega) = \Gamma_{\alpha\beta}^{\infty}(\omega) + \Gamma_{\alpha\beta}^{\infty*}(\omega), \quad (3.123)$$

$$S_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{2i} \left[\Gamma_{\alpha\beta}^{\infty}(\omega) - \Gamma_{\alpha\beta}^{\infty*}(\omega) \right]. \quad (3.124)$$

Utilizando a Eq. (3.112), pode-se calcular o coeficiente $\gamma_{\alpha\beta}(\omega)$ mostrado acima

$$\begin{aligned} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) &= \Gamma_{\alpha\beta}^{\infty}(\omega) + \Gamma_{\alpha\beta}^{\infty*}(\omega) \\ &= \int_0^{+\infty} du e^{i\omega u} \text{Tr}_R \left[\tilde{B}_\alpha(u) B_\beta(0) \rho_R \right] + \int_0^{+\infty} du e^{-i\omega u} \text{Tr}_R \left[\tilde{B}_\alpha(-u) B_\beta(0) \rho_R \right] \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{i\omega u} \text{Tr}_R \left[\tilde{B}_\alpha(u) B_\beta(0) \rho_R \right]. \end{aligned} \quad (3.125)$$

Substituindo a Eq. (3.122) na definição do Lindbladiano presente na Eq. (3.110), temos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[\tilde{\rho}(\tau)] &= \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \left\{ \Gamma_{\alpha\beta}^{\infty}(\omega) \left[A_\beta(\omega) \tilde{\rho}(\tau), A_\alpha^\dagger(\omega) \right] + \Gamma_{\beta\alpha}^{\infty*}(\omega) \left[A_\beta(\omega), \tilde{\rho}(\tau) A_\alpha^\dagger(\omega) \right] \right\} \\ &= \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \left[\frac{1}{2} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) + iS_{\alpha\beta}(\omega) \right] \left[A_\beta(\omega) \tilde{\rho}(\tau), A_\alpha^\dagger(\omega) \right] \\ &\quad + \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \left[\frac{1}{2} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) - iS_{\alpha\beta}(\omega) \right] \left[A_\beta(\omega), \tilde{\rho}(\tau) A_\alpha^\dagger(\omega) \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left\{ \left[A_\beta(\omega) \tilde{\rho}(\tau), A_\alpha^\dagger(\omega) \right] + \left[A_\beta(\omega), \tilde{\rho}(\tau) A_\alpha^\dagger(\omega) \right] \right\} \\ &\quad + i \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} S_{\alpha\beta}(\omega) \left\{ \left[A_\beta(\omega) \tilde{\rho}(\tau), A_\alpha^\dagger(\omega) \right] - \left[A_\beta(\omega), \tilde{\rho}(\tau) A_\alpha^\dagger(\omega) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.126)$$

Usando as úteis relações dos comutadores (70)

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \quad (3.127)$$

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B, \quad (3.128)$$

sendo A, B e C operadores quânticos. Podemos calcular o termo proporcional a $\gamma_{\alpha\beta}(\omega)$

$$\begin{aligned} \left[A_\beta(\omega) \tilde{\rho}(\tau), A_\alpha^\dagger(\omega) \right] + \left[A_\beta(\omega), \tilde{\rho}(\tau) A_\alpha^\dagger(\omega) \right] &= A_\beta(\omega) \left[\tilde{\rho}(\tau), A_\alpha^\dagger(\omega) \right] + \left[A_\beta(\omega), A_\alpha^\dagger(\omega) \right] \tilde{\rho}(\tau) \\ &\quad + \left[A_\beta(\omega), \tilde{\rho}(\tau) \right] A_\alpha^\dagger(\omega) + \tilde{\rho}(\tau) \left[A_\beta(\omega), A_\alpha^\dagger(\omega) \right] \\ &= A_\beta(\omega) \tilde{\rho}(\tau) A_\alpha^\dagger(\omega) - A_\beta(\omega) A_\alpha^\dagger(\omega) \tilde{\rho}(\tau) \\ &\quad + A_\beta(\omega) A_\alpha^\dagger(\omega) \tilde{\rho}(\tau) - A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) \tilde{\rho}(\tau) \\ &\quad + A_\beta(\omega) \tilde{\rho}(\tau) A_\alpha^\dagger(\omega) - \tilde{\rho}(\tau) A_\beta(\omega) A_\alpha^\dagger(\omega) \\ &\quad + \tilde{\rho}(\tau) A_\beta(\omega) A_\alpha^\dagger(\omega) - \tilde{\rho}(\tau) A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) \\ &= 2A_\beta(\omega) \tilde{\rho}(\tau) A_\alpha^\dagger(\omega) - \left\{ A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega), \tilde{\rho}(\tau) \right\}. \end{aligned} \quad (3.129)$$

De forma equivalente para o termo proporcional a $iS_{\alpha\beta(\omega)}$

$$\begin{aligned}
& [A_\beta(\omega)\tilde{\rho}(\tau), A_\alpha^\dagger(\omega)] - [A_\beta(\omega), \tilde{\rho}(\tau)A_\alpha^\dagger(\omega)] = A_\beta(\omega) [\tilde{\rho}(\tau), A_\alpha^\dagger(\omega)] + [A_\beta(\omega), A_\alpha^\dagger(\omega)] \tilde{\rho}(\tau) \\
& \quad - [A_\beta(\omega), \tilde{\rho}(\tau)] A_\alpha^\dagger(\omega) - \tilde{\rho}(\tau) [A_\beta(\omega), A_\alpha^\dagger(\omega)] \\
& = A_\beta(\omega)\tilde{\rho}(\tau)A_\alpha^\dagger(\omega) - A_\beta(\omega)A_\alpha^\dagger(\omega)\tilde{\rho}(\tau) \\
& \quad + A_\beta(\omega)A_\alpha^\dagger(\omega)\tilde{\rho}(\tau) - A_\alpha^\dagger(\omega)A_\beta(\omega)\tilde{\rho}(\tau) \\
& \quad - A_\beta(\omega)\tilde{\rho}(\tau)A_\alpha^\dagger(\omega) + \tilde{\rho}(\tau)A_\beta(\omega)A_\alpha^\dagger(\omega) \\
& \quad - \tilde{\rho}(\tau)A_\beta(\omega)A_\alpha^\dagger(\omega) + \tilde{\rho}(\tau)A_\alpha^\dagger(\omega)A_\beta(\omega) \\
& = [\tilde{\rho}(\tau), A_\alpha^\dagger(\omega)A_\beta(\omega)] \\
& = - [A_\alpha^\dagger(\omega)A_\beta(\omega), \tilde{\rho}(\tau)]. \tag{3.130}
\end{aligned}$$

Substituindo os resultados das Eqs. (3.129) e (3.130) na Eq. (3.126), resulta na seguinte equação mestra

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\tau}\tilde{\rho}(\tau) = \mathcal{L}[\tilde{\rho}(\tau)] = & -i \left[\sum_\omega \sum_{\alpha,\beta} S_{\alpha\beta}(\omega) A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega), \tilde{\rho}(\tau) \right] \\
& + \sum_\omega \sum_{\alpha,\beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[A_\beta(\omega)\tilde{\rho}(\tau)A_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \{ A_\alpha^\dagger(\omega)A_\beta(\omega), \tilde{\rho}(\tau) \} \right]. \tag{3.131}
\end{aligned}$$

Podemos definir o primeiro termo do lado direito da Eq.(3.131) como

$$H_{\text{LS}} = \sum_\omega \sum_{\alpha,\beta} S_{\alpha\beta}(\omega) A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega), \tag{3.132}$$

em que H_{LS} é chamado de Hamiltoniano *Lamb-shift* e somente representa um deslocamento nos níveis de energia do sistema, pois conforme vamos ver a seguir $[H_S, H_{\text{LS}}] = 0$. (3) Fisicamente este termo pode ser entendido como uma renormalização que o banho possui na parte unitária da dinâmica do sistema. (71) Assim sendo, definiremos os operadores como

$$H_S = \sum_\epsilon \epsilon \Pi(\epsilon), \tag{3.133}$$

$$A_\alpha(\omega) = \sum_{\epsilon', \epsilon''} \Pi(\epsilon') A_\alpha(\omega) \Pi(\epsilon''), \tag{3.134}$$

e então temos o comutador

$$\begin{aligned}
[H_S, A_\alpha(\omega)] &= \left[\sum_{\epsilon} \epsilon \Pi(\epsilon), \sum_{\epsilon', \epsilon''} \Pi(\epsilon') A_\alpha(\omega) \Pi(\epsilon'') \right] \\
&= \sum_{\epsilon} \sum_{\epsilon', \epsilon''} [\epsilon \Pi(\epsilon) \Pi(\epsilon') A_\alpha(\omega) \Pi(\epsilon'') - \Pi(\epsilon') A_\alpha(\omega) \Pi(\epsilon'') \epsilon \Pi(\epsilon)] \\
&= \sum_{\epsilon} \sum_{\epsilon', \epsilon''} [\epsilon \delta_{\epsilon, \epsilon'} \Pi(\epsilon') A_\alpha(\omega) \Pi(\epsilon'') - \epsilon \Pi(\epsilon') A_\alpha(\omega) \delta_{\epsilon'' \epsilon} \Pi(\epsilon'')] \\
&= \sum_{\epsilon', \epsilon''} [\epsilon' \Pi(\epsilon') A_\alpha(\omega) \Pi(\epsilon'') - \epsilon'' \Pi(\epsilon') A_\alpha(\omega) \Pi(\epsilon'')] \\
&= \sum_{\epsilon', \epsilon''} (\epsilon' - \epsilon'') \Pi(\epsilon') A_\alpha(\omega) \Pi(\epsilon'') \\
&= -\omega A_\alpha(\omega), \tag{3.135}
\end{aligned}$$

e conseqüentemente

$$\begin{aligned}
[H_S, A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega)] &= [H_S, A_\alpha^\dagger(\omega)] A_\beta(\omega) + A_\alpha^\dagger(\omega) [H_S, A_\beta(\omega)] \\
&= \omega A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) - \omega A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) = 0. \tag{3.136}
\end{aligned}$$

Por fim, estamos aptos a calcular o termo de *Lamb-Shift*. Usando as Eqs. (3.132), (3.135) e (3.136), obtemos

$$[H_S, H_{LS}] = \sum_{\alpha, \beta, \omega} S_{\alpha\beta}(\omega) [H_S, A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega)] = 0. \tag{3.137}$$

Reescrevendo a Eq. (3.131) usando a definição do termo de *Lamb-Shift*, temos

$$\frac{d}{d\tau} \tilde{\rho}(\tau) = -i [H_{LS}, \tilde{\rho}(\tau)] + \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[A_\beta(\omega) \tilde{\rho}(\tau) A_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \{ A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega), \tilde{\rho}(\tau) \} \right]. \tag{3.138}$$

Para provarmos que a Eq. (3.138) forma uma equação mestra Markoviana, devemos provar que a matriz $\gamma_{\alpha\beta}(\omega)$ é positiva semidefinida para toda frequência ω . O leitor mais interessado pode consultar esta demonstração no apêndice B. Por ora vamos assumir que esta condição da matriz seja satisfeita, isto é, $\gamma_{\alpha\beta}(\omega) \geq 0$.

Voltando à representação de Schrödinger, pois a mesma é a forma usual em que o Hamiltoniano contém todos os termos referente ao sistema, obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\tau} \rho_S(\tau) &= -i [H_S + g^2 H_{LS}, \rho_S(\tau)] \\
&\quad + g^2 \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[A_\beta(\omega) \rho_S(\tau) A_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \{ A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega), \rho_S(\tau) \} \right], \tag{3.139}
\end{aligned}$$

onde escrevemos o subíndice S no operador densidade apenas para frisar que a equação mestra acima representa a dinâmica do sistema e $\gamma_{\alpha\beta}(\omega)$ são chamados de coeficientes da equação mestra e representam basicamente as taxas de decaimento do sistema devido

ao seu acoplamento com reservatório, em outras palavras, os coeficientes representam a perda das características quânticas do sistema pela troca de informações que surge devido a interação com o reservatório. Além disso, como o primeiro termo do lado direito da equação (3.139) somente aplica um deslocamento dos níveis de energia do sistema S, quando estivermos no âmbito da dinâmica do sistema de interesse, este termo não será relevante. Entretanto, ele torna-se importante se a aproximação de onda girante não tivesse sido aplicada, conforme apresentado pela Ref. (72)

Por fim, vale destacar alguns pontos e considerações importantes que foram empregados durante a dedução da equação mestra presente na Eq. (3.139). O primeiro é fato que o estado inicial do sistema é escrito como

$$\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_R(0). \quad (3.140)$$

Isto significa que no instante inicial o sistema e o reservatório não possuem correlação. Assim, qualquer mapa que inicia sua dinâmica em um estado produto é dito ser CPTP. (3) Além disso, utilizou-se a aproximação de Born, na qual assume-se que o acoplamento entre o sistema e o reservatório é fraco. Isto gera duas importantes consequências, a primeira é que após a dinâmica, o operador densidade é descorrelacionado, já que o estado inicial é um estado produto. A segunda é o fato de que podemos desprezar os termos superiores a segunda ordem na expansão do operador evolução temporal e conseqüentemente na equação mestra. Outra aproximação aplicada é a que chamamos de aproximação de onda girante ou aproximação secular, na qual somente serão considerados os termos em que a frequência do sistema é igual a frequência do reservatório. Esta aproximação implica no surgimento do termo extra H_{LS} na equação mestra. Entretanto, como $[H_S, H_{LS}] = 0$, o termo H_{LS} somente aplica um deslocamento dos níveis de energia do sistema S. Logo, quando estivermos no âmbito da dinâmica do sistema de interesse este termo não será considerado. Porém, ele torna-se importante se a aproximação de onda girante não for aplicada, conforme apresentado pela Ref. (72)

3.4 Exemplos

Nesta seção iremos apresentar alguns exemplos de aplicação do conteúdo apresentado anteriormente e desenvolver a equação mestra para alguns sistemas físicos mais utilizados na literatura. Os exemplos apresentados aqui se encontram na Ref. (3) O leitor mais interessado pode encontrar outros exemplos interessantes na Ref. (18)

3.4.1 Atenuação de amplitude

Como primeiro exemplo, aplicaremos as ferramentas matemáticas desenvolvidas na Sec. 3.2 e será construída a equação mestra presente na Eq. (3.139), no caso específico para um q-bit sob a ação do canal de atenuação de amplitude. De forma específica, o

modelo é um sistema de dois níveis amortecido por um banho bosônico de osciladores harmônicos. (3) O Hamiltoniano total do sistema pode ser escrito como

$$\begin{aligned} H &= H_S + H_R + H_{\text{int}} \\ &= \frac{\omega_0}{2} \sigma_z + \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k + \sum_k g_k (\sigma_+ b_k + \sigma_- b_k^\dagger), \end{aligned} \quad (3.141)$$

em que ω_0 é a frequência do sistema, g_k é a constante de acoplamento entre o sistema e o banho^a, σ_z é a matriz de Pauli usual, $\sigma_\pm = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$ (51) e b_k^\dagger, b_k são os operadores de levantamento e abaixamento do banho. O Hamiltoniano H_{int} representa o termo de troca de informação entre o sistema e o banho. Trabalhando com o termo de interação entre o sistema e o banho,

$$H_{\text{int}} = \sigma_+ \otimes \sum_k g_k b_k + \sigma_- \otimes \sum_k b_k^\dagger = A_1 \otimes B_1 + A_2 \otimes B_2. \quad (3.142)$$

Todavia, os operadores A_k e B_k com $k = 1, 2$ não são hermitianos. Para corrigir este problema vamos fazer uso da decomposição de operadores. Seja V um Hamiltoniano de interação semelhante a H_{int} , escrito da seguinte maneira

$$V = \sum_k X_k^\dagger \otimes Y_k + X_k \otimes Y_k^\dagger, \quad (3.143)$$

em que qualquer operador pode ser decomposto como $X_k = X_k^{(a)} + iX_k^{(b)}$, $Y_k = Y_k^{(a)} + iY_k^{(b)}$ e

$$X_k^{(a)} = \frac{X_k^\dagger + X_k}{2}, \quad X_k^{(b)} = \frac{i(X_k^\dagger - X_k)}{2}, \quad (3.144)$$

$$Y_k^{(a)} = \frac{Y_k^\dagger + Y_k}{2}, \quad Y_k^{(b)} = \frac{i(Y_k^\dagger - Y_k)}{2}. \quad (3.145)$$

Reescrevendo o termo de interação

$$\begin{aligned} V &= \sum_k X_k^\dagger \otimes Y_k + X_k \otimes Y_k^\dagger \\ &= \sum_k (X_k^{(a)} - iX_k^{(b)}) \otimes (Y_k^{(a)} + iY_k^{(b)}) + (X_k^{(a)} + iX_k^{(b)}) \otimes (Y_k^{(a)} - iY_k^{(b)}) \\ &= \sum_k X_k^{(a)} \otimes Y_k^{(a)} + iX_k^{(a)} \otimes Y_k^{(b)} - iX_k^{(b)} \otimes Y_k^{(a)} + X_k^{(b)} \otimes Y_k^{(b)} \\ &\quad + X_k^{(a)} \otimes Y_k^{(a)} - iX_k^{(a)} \otimes Y_k^{(b)} + iX_k^{(b)} \otimes Y_k^{(a)} + X_k^{(b)} \otimes Y_k^{(b)} \\ &= 2 \sum_k X_k^{(a)} \otimes Y_k^{(a)} + X_k^{(b)} \otimes Y_k^{(b)} \end{aligned} \quad (3.146)$$

Utilizando a Eq. (3.146) podemos reescrever o termo de interação presente na Eq. (3.142)

$$H_{\text{int}} = (\sigma_+ + \sigma_-) \otimes \sum_k g_k \frac{(b_k^\dagger + b_k)}{2} + i(\sigma_+ - \sigma_-) \otimes \sum_k g_k \frac{i(b_k^\dagger - b_k)}{2} = A_1 \otimes B_1 + A_2 \otimes B_2. \quad (3.147)$$

^aNos exemplos vamos considerar que o reservatório é um banho térmico com temperatura T . Assim, daqui para frente vamos nos referir ao reservatório como um banho.

Escrevendo os termos A_k e B_k explicitamente

$$A_1 = \sigma_+ + \sigma_-, \quad B_1 = \sum_k g_k \frac{(b_k^\dagger + b_k)}{2} \quad (3.148)$$

$$A_2 = i(\sigma_+ - \sigma_-), \quad B_2 = i \sum_k g_k \frac{(b_k^\dagger - b_k)}{2}. \quad (3.149)$$

Escrevendo H_{int} no referencial de interação

$$\tilde{H}_{\text{int}}(t) = \tilde{A}_1(t) \otimes \tilde{B}_1(t) + \tilde{A}_2(t) \otimes \tilde{B}_2(t), \quad (3.150)$$

em que

$$\tilde{A}_1(t) = \tilde{\sigma}_+(t) + \tilde{\sigma}_-(t) = e^{i\omega_0 t} \sigma_+ + e^{-i\omega_0 t} \sigma_- \quad (3.151)$$

$$\tilde{A}_2(t) = i[\tilde{\sigma}_+(t) - \tilde{\sigma}_-(t)] = i(e^{i\omega_0 t} \sigma_+ - e^{-i\omega_0 t} \sigma_-) \quad (3.152)$$

$$\tilde{B}_1(t) = \frac{1}{2} \sum_k g_k [\tilde{b}_k^\dagger(t) + \tilde{b}_k(t)] = \frac{1}{2} \sum_k g_k (e^{i\omega_k t} b_k^\dagger + e^{-i\omega_k t} b_k) \quad (3.153)$$

$$\tilde{B}_2(t) = \frac{i}{2} \sum_k g_k [\tilde{b}_k^\dagger(t) - \tilde{b}_k(t)] = \frac{i}{2} \sum_k g_k (e^{i\omega_k t} b_k^\dagger - e^{-i\omega_k t} b_k) \quad (3.154)$$

Observando as equações acima é possível determinar os operadores

$$A_1(\omega_0) = \sigma_-, \quad A_2(\omega_0) = -i\sigma_-, \quad (3.155)$$

$$A_1(-\omega_0) = \sigma_+, \quad A_2(-\omega_0) = i\sigma_+, \quad (3.156)$$

$$B_1(\omega_k) = \frac{1}{2} \sum_k g_k b_k, \quad B_2(\omega_k) = \frac{-i}{2} \sum_k g_k b_k, \quad (3.157)$$

$$B_1(-\omega_k) = \frac{1}{2} \sum_k g_k b_k^\dagger, \quad B_2(-\omega_k) = \frac{i}{2} \sum_k g_k b_k^\dagger. \quad (3.158)$$

Considerando que o banho se encontra em um estado térmico governado pela distribuição de Boltzmann (3,47)

$$\rho_R = \frac{e^{-\beta H_S}}{\text{Tr}(e^{\beta H_S})}, \quad (3.159)$$

sendo $\beta = 1/T$ e T a temperatura em que o banho se encontra. Ainda, temos as seguintes relações para os operadores de criação e aniquilação do banho térmico (2)

$$\langle b_k b_{k'} \rangle = \langle b_k^\dagger b_{k'}^\dagger \rangle = 0, \quad (3.160)$$

$$\langle b_k^\dagger b_{k'} \rangle = \delta_{kk'} N(\omega_k), \quad (3.161)$$

$$\langle b_k b_{k'}^\dagger \rangle = \delta_{kk'} [N(\omega_k) + 1], \quad (3.162)$$

$$N(\omega_k) = \frac{1}{e^{\beta\omega_k} - 1}, \quad (3.163)$$

na qual $N(\omega_k)$ é a distribuição de Bose-Einstein e representa o número médio de partículas em uma determinada frequência ω_k . (2) Assim, podemos calcular os elementos da matriz de decoerência, presentes na Eq. (3.125)

$$\gamma_{\alpha\beta}(\omega_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega_0 t} \text{Tr}_R [\tilde{B}_\alpha(t) B_\beta(0) \rho_R] = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega_0 t} \langle \tilde{B}_\alpha(t) B_\beta(0) \rangle. \quad (3.164)$$

Calculando as médias dos operadores do banho, obtemos

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{B}_1(t) B_1(0) \rangle &= \left\langle \left[\frac{1}{2} \sum_k g_k (e^{i\omega_k t} b_k^\dagger + e^{-i\omega_k t} b_k) \right] \left[\frac{1}{2} \sum_{k'} g_{k'} (b_{k'}^\dagger + b_{k'}) \right] \right\rangle \\
&= \frac{1}{4} \sum_{k, k'} g_k g_{k'} \left[e^{i\omega_k t} (\langle b_k^\dagger b_{k'}^\dagger \rangle + \langle b_k^\dagger b_{k'} \rangle) + e^{-i\omega_k t} (\langle b_k b_{k'}^\dagger \rangle + \langle b_k b_{k'} \rangle) \right] \\
&= \frac{1}{4} \sum_{k, k'} g_k g_{k'} (e^{i\omega_k t} \langle b_k^\dagger b_{k'} \rangle + e^{-i\omega_k t} \langle b_k b_{k'}^\dagger \rangle) \\
&= \frac{1}{4} \sum_{k, k'} g_k g_{k'} \left\{ e^{i\omega_k t} \delta_{kk'} N(\omega_k) + e^{-i\omega_k t} \delta_{kk'} [1 + N(\omega_k)] \right\} \\
&= \frac{1}{4} \sum_k |g_k|^2 \left\{ e^{i\omega_k t} N(\omega_k) + e^{-i\omega_k t} [1 + N(\omega_k)] \right\}, \tag{3.165}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{B}_1(t) B_2(0) \rangle &= \left\langle \left[\frac{1}{2} \sum_k g_k (e^{i\omega_k t} b_k^\dagger + e^{-i\omega_k t} b_k) \right] \left[\frac{i}{2} \sum_{k'} g_{k'} (b_{k'}^\dagger - b_{k'}) \right] \right\rangle \\
&= \frac{i}{4} \sum_{k, k'} g_k g_{k'} \left[e^{i\omega_k t} (\langle b_k^\dagger b_{k'}^\dagger \rangle - \langle b_k^\dagger b_{k'} \rangle) + e^{-i\omega_k t} (\langle b_k b_{k'}^\dagger \rangle - \langle b_k b_{k'} \rangle) \right] \\
&= \frac{i}{4} \sum_{k, k'} g_k g_{k'} (-e^{i\omega_k t} \langle b_k^\dagger b_{k'} \rangle + e^{-i\omega_k t} \langle b_k b_{k'}^\dagger \rangle) \\
&= \frac{i}{4} \sum_{k, k'} g_k g_{k'} \left\{ -e^{i\omega_k t} \delta_{kk'} N(\omega_k) + e^{-i\omega_k t} \delta_{kk'} [1 + N(\omega_k)] \right\} \\
&= \frac{i}{4} \sum_k |g_k|^2 \left\{ -e^{i\omega_k t} N(\omega_k) + e^{-i\omega_k t} [1 + N(\omega_k)] \right\}, \tag{3.166}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{B}_2(t) B_1(0) \rangle &= \left\langle \left[\frac{i}{2} \sum_k g_k (e^{i\omega_k t} b_k^\dagger - e^{-i\omega_k t} b_k) \right] \left[\frac{1}{2} \sum_{k'} g_{k'} (b_{k'}^\dagger + b_{k'}) \right] \right\rangle \\
&= \frac{i}{4} \sum_{k, k'} g_k g_{k'} \left[e^{i\omega_k t} (\langle b_k^\dagger b_{k'}^\dagger \rangle + \langle b_k^\dagger b_{k'} \rangle) - e^{-i\omega_k t} (\langle b_k b_{k'}^\dagger \rangle + \langle b_k b_{k'} \rangle) \right] \\
&= \frac{i}{4} \sum_{k, k'} g_k g_{k'} (e^{i\omega_k t} \langle b_k^\dagger b_{k'} \rangle - e^{-i\omega_k t} \langle b_k b_{k'}^\dagger \rangle) \\
&= \frac{i}{4} \sum_{k, k'} g_k g_{k'} \left\{ e^{i\omega_k t} \delta_{kk'} N(\omega_k) - e^{-i\omega_k t} \delta_{kk'} [1 + N(\omega_k)] \right\} \\
&= \frac{i}{4} \sum_k |g_k|^2 \left\{ e^{i\omega_k t} N(\omega_k) - e^{-i\omega_k t} [1 + N(\omega_k)] \right\}, \tag{3.167}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{B}_2(t) B_2(0) \rangle &= \left\langle \left[\frac{i}{2} \sum_k g_k (e^{i\omega_k t} b_k^\dagger - e^{-i\omega_k t} b_k) \right] \left[\frac{i}{2} \sum_{k'} g_{k'} (b_{k'}^\dagger - b_{k'}) \right] \right\rangle \\
&= \frac{-1}{4} \sum_{k, k'} g_k g_{k'} \left[e^{i\omega_k t} (\langle b_k^\dagger b_{k'}^\dagger \rangle - \langle b_k^\dagger b_{k'} \rangle) + e^{-i\omega_k t} (-\langle b_k b_{k'}^\dagger \rangle + \langle b_k b_{k'} \rangle) \right] \\
&= \frac{1}{4} \sum_{k, k'} g_k g_{k'} (e^{i\omega_k t} \langle b_k^\dagger b_{k'} \rangle + e^{-i\omega_k t} \langle b_k b_{k'}^\dagger \rangle) \\
&= \frac{1}{4} \sum_{k, k'} g_k g_{k'} \left\{ e^{i\omega_k t} \delta_{kk'} N(\omega_k) + e^{-i\omega_k t} \delta_{kk'} [1 + N(\omega_k)] \right\} \\
&= \frac{1}{4} \sum_k |g_k|^2 \left\{ e^{i\omega_k t} N(\omega_k) + e^{-i\omega_k t} [1 + N(\omega_k)] \right\}. \tag{3.168}
\end{aligned}$$

Conforme visto na Sec. 3.3.2 é assumido que o banho possui infinitos graus de liberdade, sendo necessário passar as correlações para o espectro contínuo. Aplicando a relação (73)

$$\sum_k f(\omega_k) \rightarrow \int_0^{+\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{|g(\omega)|^2} f(\omega), \quad (3.169)$$

na qual $f(\omega_k)$ é uma função qualquer das frequências do banho e $J(\omega)$ é a densidade espectral que mostra como a força de acoplamento varia com a frequência. (2) As correlações então assumem a seguinte forma

$$\langle \tilde{B}_1(t) B_1(0) \rangle = \frac{1}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left\{ e^{i\omega t} N(\omega) + e^{-i\omega t} [1 + N(\omega)] \right\}, \quad (3.170)$$

$$\langle \tilde{B}_1(t) B_2(0) \rangle = \frac{i}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left\{ -e^{i\omega t} N(\omega) + e^{-i\omega t} [1 + N(\omega)] \right\}, \quad (3.171)$$

$$\langle \tilde{B}_2(t) B_1(0) \rangle = \frac{i}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left\{ e^{i\omega t} N(\omega) - e^{-i\omega t} [1 + N(\omega)] \right\}, \quad (3.172)$$

$$\langle \tilde{B}_2(t) B_2(0) \rangle = \frac{1}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left\{ e^{i\omega t} N(\omega) + e^{-i\omega t} [1 + N(\omega)] \right\}. \quad (3.173)$$

Usando a representação da função delta (74)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} du e^{i(\omega - \omega_0)u} = 2\pi \delta(\omega - \omega_0), \quad (3.174)$$

podemos calcular os coeficientes da equação mestra^o

$$\begin{aligned} \gamma_{11}(\omega_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega_0 t} \langle \tilde{B}_1(t) B_1(0) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega_0 t} \frac{1}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left\{ e^{i\omega t} N(\omega) + e^{-i\omega t} [1 + N(\omega)] \right\} \\ &= \frac{1}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\{ e^{i(\omega_0 + \omega)t} N(\omega) + e^{i(\omega_0 - \omega)t} [1 + N(\omega)] \right\} \\ &= \frac{1}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left\{ 2\pi \delta(\omega + \omega_0) N(\omega) + 2\pi \delta(\omega + \omega_0) [1 + N(\omega)] \right\}. \end{aligned} \quad (3.175)$$

Como ω_0 é positivo a contribuição referente ao termo $\delta(\omega + \omega_0)$ é nula, pois $\delta(\omega + \omega_0) = \delta[\omega - (-\omega_0)]$ e $-\omega_0$ está fora do domínio de integração, resultando em um termo somente proporcional a $\delta(\omega - \omega_0)$. Já para o caso contrário em que $\omega_0 < 0$, somente o termo proporcional a $\delta(\omega + \omega_0)$ sobrevive. Assim, obtemos

$$\gamma_{11}(\omega_0) = \frac{2\pi}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) [1 + N(\omega_0)] \delta(\omega - \omega_0) = \frac{\pi}{2} J(\omega_0) [1 + N(\omega_0)], \quad (3.176)$$

$$\gamma_{11}(-\omega_0) = \frac{2\pi}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) N(\omega_0) \delta(\omega + \omega_0) = \frac{\pi}{2} J(\omega_0) N(\omega_0). \quad (3.177)$$

^oLembrando que a função delta (74, 75) é uma função par, então $\delta(\omega_0 - \omega) = \delta[-(\omega - \omega_0)] = \delta(\omega - \omega_0)$.

De forma equivalente para os outros elementos da matriz decoerência

$$\begin{aligned}
\gamma_{12}(\omega_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega_0 t} \langle \tilde{B}_1(t) B_2(0) \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega_0 t} \frac{i}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left\{ -e^{i\omega t} N(\omega) + e^{-i\omega t} [1 + N(\omega)] \right\} \\
&= \frac{i}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\{ -e^{i(\omega_0+\omega)t} N(\omega) + e^{i(\omega_0-\omega)t} [1 + N(\omega)] \right\} \\
&= \frac{i}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left\{ -2\pi \delta(\omega + \omega_0) N(\omega) + 2\pi \delta(\omega + \omega_0) [1 + N(\omega)] \right\}, \quad (3.178)
\end{aligned}$$

gerando assim

$$\gamma_{12}(\omega_0) = \frac{2\pi i}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) [1 + N(\omega_0)] \delta(\omega - \omega_0) = \frac{i\pi}{2} J(\omega_0) [1 + N(\omega_0)], \quad (3.179)$$

$$\gamma_{12}(-\omega_0) = \frac{-2\pi i}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) N(\omega_0) \delta(\omega + \omega_0) = \frac{-\pi}{2} J(\omega_0) N(\omega_0). \quad (3.180)$$

Para o termo $\gamma_{21}(\omega_0)$

$$\begin{aligned}
\gamma_{21}(\omega_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega_0 t} \langle \tilde{B}_2(t) B_1(0) \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega_0 t} \frac{i}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left\{ e^{i\omega t} N(\omega) - e^{-i\omega t} [1 + N(\omega)] \right\} \\
&= \frac{i}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\{ e^{i(\omega_0+\omega)t} N(\omega) - e^{i(\omega_0-\omega)t} [1 + N(\omega)] \right\} \\
&= \frac{i}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left\{ 2\pi \delta(\omega + \omega_0) N(\omega) - 2\pi \delta(\omega + \omega_0) [1 + N(\omega)] \right\}, \quad (3.181)
\end{aligned}$$

gerando assim

$$\gamma_{21}(\omega_0) = \frac{-2\pi i}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) [1 + N(\omega_0)] \delta(\omega - \omega_0) = \frac{-i\pi}{2} J(\omega_0) [1 + N(\omega_0)], \quad (3.182)$$

$$\gamma_{21}(-\omega_0) = \frac{2\pi i}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) N(\omega_0) \delta(\omega + \omega_0) = \frac{i\pi}{2} J(\omega_0) N(\omega_0). \quad (3.183)$$

Por fim, para o termo $\gamma_{22}(\omega_0)$

$$\begin{aligned}
\gamma_{22}(\omega_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega_0 t} \langle \tilde{B}_2(t) B_2(0) \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega_0 t} \frac{1}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left\{ e^{i\omega t} N(\omega) + e^{-i\omega t} [1 + N(\omega)] \right\} \\
&= \frac{1}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\{ e^{i(\omega_0+\omega)t} N(\omega) + e^{i(\omega_0-\omega)t} [1 + N(\omega)] \right\} \\
&= \frac{1}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left\{ 2\pi \delta(\omega + \omega_0) N(\omega) + 2\pi \delta(\omega + \omega_0) [1 + N(\omega)] \right\}, \quad (3.184)
\end{aligned}$$

gerando assim

$$\gamma_{22}(\omega_0) = \frac{2\pi}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) [1 + N(\omega_0)] \delta(\omega - \omega_0) = \frac{\pi}{2} J(\omega_0) [1 + N(\omega_0)], \quad (3.185)$$

$$\gamma_{22}(-\omega_0) = \frac{2\pi}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) N(\omega_0) \delta(\omega + \omega_0) = \frac{\pi}{2} J(\omega_0) N(\omega_0). \quad (3.186)$$

Coletando os elementos da matriz $\gamma_{\alpha\beta}(\omega_0)$ e reescrevendo os mesmos em uma notação mais compacta, temos

$$\gamma(\omega_0) = \frac{\pi}{2} J(\omega_0) [1 + N(\omega_0)] \begin{bmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{bmatrix}, \quad (3.187)$$

$$\gamma(-\omega_0) = \frac{\pi}{2} J(\omega_0) N(\omega_0) \begin{bmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.188)$$

Nossa próxima tarefa é calcular o Hamiltoniano *Lamb-Shift*, contido na Eq. (3.132). Para isso, vamos utilizar a seguinte relação^P

$$\begin{aligned} S_{\alpha\beta}(\omega_0) &= \text{P.V.} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\text{Tr} [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R]}{\omega_0 - \omega'} \\ &= \text{P.V.} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\langle B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rangle}{\omega_0 - \omega'}, \end{aligned} \quad (3.189)$$

sendo P.V. o valor principal de Cauchy (do inglês *Cauchy Principal Value*). Usando as Eqs. (3.157), (3.158) e as transformando no limite do contínuo equivalentemente ao que foi aplicado na Eq. (3.169), temos

$$\begin{aligned} S_{11}(\omega_0) &= \text{P.V.} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\langle B_1(\omega) B_1(0) \rangle}{\omega_0 - \omega} \\ &= \text{P.V.} \int_0^{+\infty} d\omega \frac{\langle B_1(\omega) B_1(0) \rangle}{\omega_0 - \omega} + \text{P.V.} \int_0^{+\infty} d\omega \frac{\langle B_1(-\omega) B_1(0) \rangle}{\omega_0 + \omega} \\ &= \frac{1}{4} \text{P.V.} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left[\frac{1 + N(\omega)}{\omega_0 - \omega} + \frac{N(\omega)}{\omega_0 + \omega} \right]. \end{aligned} \quad (3.190)$$

Observe que a expressão para $S_{11}(\omega_0)$ é semelhante a Eq. (3.175). Entretanto, como o operador B_1 não foi escrito na representação de interação não foi possível aplicar a Eq. (3.174) e utilizar a representação da função delta, restando a integral a ser calculada. De forma equivalente para frequências $\omega_0 < 0$

$$S_{11}(-\omega_0) = \frac{-1}{4} \text{P.V.} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left[\frac{1 + N(\omega)}{\omega_0 + \omega} + \frac{N(\omega)}{\omega_0 - \omega} \right]. \quad (3.191)$$

Semelhante a matriz $\gamma(\omega)$

$$S_{22}(\omega_0) = S_{11}(\omega_0) = \frac{1}{4} \text{P.V.} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left[\frac{1 + N(\omega)}{\omega_0 - \omega} + \frac{N(\omega)}{\omega_0 + \omega} \right], \quad (3.192)$$

$$S_{22}(-\omega_0) = S_{11}(-\omega_0) = \frac{-1}{4} \text{P.V.} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left[\frac{1 + N(\omega)}{\omega_0 + \omega} + \frac{N(\omega)}{\omega_0 - \omega} \right]. \quad (3.193)$$

Para os termos fora da diagonal

$$S_{12}(\omega_0) = S_{21}^*(\omega_0) = \frac{i}{4} \text{P.V.} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left[\frac{1 + N(\omega)}{\omega_0 - \omega} - \frac{N(\omega)}{\omega_0 + \omega} \right], \quad (3.194)$$

$$S_{12}(-\omega_0) = S_{21}^*(-\omega_0) = \frac{-i}{4} \text{P.V.} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left[\frac{1 + N(\omega)}{\omega_0 + \omega} + \frac{N(\omega)}{\omega_0 - \omega} \right]. \quad (3.195)$$

^PO leitor mais interessado pode consultar a demonstração da relação no apêndice C.

Lembrando das definições dos operadores $A_1(\omega)$ e $A_2(\omega)$, e da relação de comutação

$$A_1(\omega) = \sigma_-, \quad A_2(\omega) = -i\sigma_-, \quad (3.196)$$

$$A_1(-\omega) = \sigma_+, \quad A_2(-\omega) = i\sigma_+, \quad (3.197)$$

$$[\sigma_+, \sigma_-] = \sigma_z, \quad (3.198)$$

$$\{\sigma_+, \sigma_-\} = \mathbf{1}, \quad (3.199)$$

podemos aplicar as expressões dos termos $S_k(\omega_0)$ na definição do Hamiltoniano *Lamb-Shift*, Eq. (3.132), obtendo o seguinte resultado

$$\begin{aligned} H_{LS} &= \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} S_{\alpha\beta}(\omega) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega) \\ &= \text{P.V.} \int_0^{+\infty} d\omega \frac{J(\omega)N(\omega)}{\omega_0 - \omega} [\sigma_+, \sigma_-] + \text{P.V.} \int_0^{+\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega_0 - \omega} \sigma_+ \sigma_- \\ &= \text{P.V.} \int_0^{+\infty} d\omega \frac{J(\omega)N(\omega)}{\omega_0 - \omega} \sigma_z + \text{P.V.} \int_0^{+\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega_0 - \omega} \frac{(\sigma_z + \mathbf{1})}{2} \\ &\equiv \left(\Delta' + \frac{\Delta}{2} \right) \sigma_z + \frac{\Delta}{2} \mathbf{1}, \end{aligned} \quad (3.200)$$

em que Δ representa o termo de *Lamb-Shift* usual independente da temperatura e Δ' representa o deslocamento devido a temperatura do banho térmico. (3) Desta maneira, usando a Eq. (3.139), podemos calcular

$$\begin{aligned} &\sum_{\omega > 0} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[A_{\beta}(\omega) \rho_S(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - \frac{1}{2} \{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega), \rho_S(t) \} \right] \\ &= \gamma_{11}(\omega_0) \left[A_1(\omega_0) \rho_S(t) A_1^{\dagger}(\omega_0) - \frac{1}{2} \{ A_1^{\dagger}(\omega_0) A_1(\omega_0), \rho_S(t) \} \right] \\ &\quad + \gamma_{12}(\omega_0) \left[A_2(\omega_0) \rho_S(t) A_1^{\dagger}(\omega_0) - \frac{1}{2} \{ A_1^{\dagger}(\omega_0) A_2(\omega_0), \rho_S(t) \} \right] \\ &\quad + \gamma_{21}(\omega_0) \left[A_1(\omega_0) \rho_S(t) A_2^{\dagger}(\omega_0) - \frac{1}{2} \{ A_2^{\dagger}(\omega_0) A_1(\omega_0), \rho_S(t) \} \right] \\ &\quad + \gamma_{22}(\omega_0) \left[A_2(\omega_0) \rho_S(t) A_2^{\dagger}(\omega_0) - \frac{1}{2} \{ A_2^{\dagger}(\omega_0) A_2(\omega_0), \rho_S(t) \} \right] \\ &= [\gamma_{11}(\omega_0) - i\gamma_{12}(\omega_0) + i\gamma_{21}(\omega_0) + \gamma_{22}(\omega_0)] \left[\sigma_- \rho_S(t) \sigma_+ - \frac{1}{2} \{ \sigma_+ \sigma_-, \rho_S(t) \} \right] \\ &= 2\pi J(\omega_0) [1 + N(\omega_0)] \left[\sigma_- \rho_S(t) \sigma_+ - \frac{1}{2} \{ \sigma_+ \sigma_-, \rho_S(t) \} \right]. \end{aligned} \quad (3.201)$$

Equivalentemente para a frequência $-\omega_0$

$$\begin{aligned} &\sum_{\omega < 0} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[A_{\beta}(\omega) \rho_S(t) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) - \frac{1}{2} \{ A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega), \rho_S(t) \} \right] \\ &= 2\pi J(\omega_0) N(\omega_0) \left[\sigma_+ \rho_S(t) \sigma_- - \frac{1}{2} \{ \sigma_- \sigma_+, \rho_S(t) \} \right]. \end{aligned} \quad (3.202)$$

Assim, podemos finalmente escrever a equação mestra do sistema

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_S(t) = & -i \left[\left(\frac{\omega_0 + \Delta}{2} + \Delta' \right) \sigma_z, \rho_S(t) \right] \\ & + 2\pi J(\omega_0) [1 + N(\omega_0)] \left[\sigma_- \rho_S(t) \sigma_+ - \frac{1}{2} \{ \sigma_+ \sigma_-, \rho_S(t) \} \right] \\ & + 2\pi J(\omega_0) N(\omega_0) \left[\sigma_+ \rho_S(t) \sigma_- - \frac{1}{2} \{ \sigma_- \sigma_+, \rho_S(t) \} \right], \end{aligned} \quad (3.203)$$

sendo que o termo proporcional a $\mathbf{1}$ foi descartado, pois temos que $[\rho_S(t), \mathbf{1}] = 0$, não contribuindo dessa forma para a dinâmica do sistema.

3.4.2 Oscilador harmônico

O segundo exemplo apresentado é o caso de um oscilador harmônico acoplado por um banho bosônico. (2,3) O Hamiltoniano que descreve o modelo é escrito como

$$\begin{aligned} H = & H_S + H_R + H_{\text{int}} \\ = & \frac{\omega_0}{2} a^\dagger a + \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k + \sum_k g_k (a^\dagger b_k + a b_k^\dagger), \end{aligned} \quad (3.204)$$

em que ω_0 é a frequência do sistema, g_k é a constante de acoplamento entre o sistema e o banho, a e a^\dagger são operadores de criação e destruição do sistema e b_k, b_k^\dagger são os operadores de criação e destruição do banho. Trabalhando com o termo de interação entre o sistema e o banho,

$$H_{\text{int}} = a^\dagger \otimes \sum_k g_k b_k + a \otimes \sum_k b_k^\dagger = A_1 \otimes B_1 + A_2 \otimes B_2. \quad (3.205)$$

Assim, é possível observar que o exemplo em questão é semelhante ao exemplo de atenuação de amplitude, apresentado na Sec. 3.4.1, bastando fazer a seguinte transformação para adaptarmos os resultados obtidos neste modelo

$$\sigma_+ \rightarrow a^\dagger \quad (3.206)$$

$$\sigma_- \rightarrow a. \quad (3.207)$$

Os operadores A_k e B_k são

$$A_1 = a^\dagger + a, \quad B_1 = \sum_k g_k \frac{(b_k^\dagger + b_k)}{2} \quad (3.208)$$

$$A_2 = i(a^\dagger - a), \quad B_2 = i \sum_k g_k \frac{(b_k^\dagger - b_k)}{2}. \quad (3.209)$$

Escrevendo os operadores na representação de interação, temos

$$\tilde{A}_1(t) = \tilde{a}^\dagger(t) + \tilde{a}(t) = e^{i\omega_0 t} a^\dagger + e^{-i\omega_0 t} a \quad (3.210)$$

$$\tilde{A}_2(t) = i [\tilde{a}^\dagger(t) - \tilde{a}(t)] = i (e^{i\omega_0 t} a^\dagger - e^{-i\omega_0 t} a) \quad (3.211)$$

$$\tilde{B}_1(t) = \frac{1}{2} \sum_k g_k [\tilde{b}_k^\dagger(t) + \tilde{b}_k(t)] = \frac{1}{2} \sum_k g_k (e^{i\omega_k t} b_k^\dagger + e^{-i\omega_k t} b_k) \quad (3.212)$$

$$\tilde{B}_2(t) = \frac{i}{2} \sum_k g_k [\tilde{b}_k^\dagger(t) - \tilde{b}_k(t)] = \frac{i}{2} \sum_k g_k (e^{i\omega_k t} b_k^\dagger - e^{-i\omega_k t} b_k) \quad (3.213)$$

Observando as equações acima é possível determinar os operadores

$$A_1(\omega_0) = a, \quad A_2(\omega_0) = -ia, \quad (3.214)$$

$$A_1(-\omega_0) = a^\dagger, \quad A_2(-\omega_0) = ia^\dagger, \quad (3.215)$$

$$B_1(\omega_k) = \frac{1}{2} \sum_k g_k b_k, \quad B_2(\omega_k) = \frac{-i}{2} \sum_k g_k b_k, \quad (3.216)$$

$$B_1(-\omega_k) = \frac{1}{2} \sum_k g_k b_k^\dagger, \quad B_2(-\omega_k) = \frac{i}{2} \sum_k g_k b_k^\dagger. \quad (3.217)$$

Assim, aplicando os resultados na Eq. (3.203) obtemos a equação mestra

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_S(t) = & -i [\omega_0 a^\dagger a + H_{LS}, \rho_S(t)] \\ & + 2\pi J(\omega_0) [1 + N(\omega_0)] \left[a \rho_S(t) a^\dagger - \frac{1}{2} \{a^\dagger a, \rho_S(t)\} \right] \\ & + 2\pi J(\omega_0) N(\omega_0) \left[a^\dagger \rho_S(t) a - \frac{1}{2} \{aa^\dagger, \rho_S(t)\} \right]. \end{aligned} \quad (3.218)$$

Entretanto, como a relação de comutação dos operadores é diferente, temos que adaptar o termo de *Lamb-Shift*. Utilizando o segundo termo da Eq. (3.200) (o termo proporcional as integrais dependentes de $[\sigma_+, \sigma_-]$ e $\sigma_+ \sigma_-$)

$$\begin{aligned} H_{LS} = & \text{P.V.} \int_0^{+\infty} d\omega \frac{J(\omega) N(\omega)}{\omega_0 - \omega} [a^\dagger, a] + \text{P.V.} \int_0^{+\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega_0 - \omega} a^\dagger a \\ = & -\text{P.V.} \int_0^{+\infty} d\omega \frac{J(\omega) N(\omega)}{\omega_0 - \omega} \mathbf{1} + \text{P.V.} \int_0^{+\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega_0 - \omega} a^\dagger a \\ \equiv & -\Delta' \mathbf{1} + \Delta a^\dagger a, \end{aligned} \quad (3.219)$$

em que usamos a relação de comutação $[a^\dagger, a] = -[a, a^\dagger] = -\mathbf{1}$. Podemos então construir a equação mestra final, levando-se em consideração o fato que o termo proporcional a $\mathbf{1}$ não contribui para a dinâmica do sistema. Desta maneira, aplicando o resultado da Eq. (3.219) na Eq. (3.218)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_S(t) = & -i [(\omega_0 + \Delta) a^\dagger a, \rho_S(t)] \\ & + 2\pi J(\omega_0) [1 + N(\omega_0)] \left[a \rho_S(t) a^\dagger - \frac{1}{2} \{a^\dagger a, \rho_S(t)\} \right] \\ & + 2\pi J(\omega_0) N(\omega_0) \left[a^\dagger \rho_S(t) a - \frac{1}{2} \{aa^\dagger, \rho_S(t)\} \right]. \end{aligned} \quad (3.220)$$

3.4.3 Atenuação de fase

O terceiro e último exemplo apresentado é um sistema de dois níveis sob uma atuação de fase. O Hamiltoniano que descreve o modelo é

$$\begin{aligned} H = & H_S + H_R + H_{\text{int}} \\ = & \frac{\omega_0}{2} \sigma_z + \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k + \sigma_z \sum_k g_k (b_k + b_k^\dagger), \end{aligned} \quad (3.221)$$

em que ω_0 é a frequência do sistema, σ_z é a matriz usual de Pauli, g_k é a constante de acoplamento entre o sistema e o banho e b_k, b_k^\dagger são os operadores de criação e destruição do banho. Ao contrário dos exemplos anteriores, como o Hamiltoniano de interação comuta com o Hamiltoniano do sistema, isto é, $[H, H_{\text{int}}] = 0$, temos que as populações⁹ do operador densidade permanecem invariante. Com isso, a dinâmica afeta somente a decoerência e preserva a energia do sistema. Todavia, este modelo possui uma solução exata (2, 76). Reescrevendo H_{int} na representação de interação

$$\tilde{H}_{\text{int}} = \sigma_z \otimes \sum_k g_k [\tilde{b}_k(t) + \tilde{b}_k^\dagger(t)] = \tilde{A}(t) \otimes \tilde{B}(t), \quad (3.222)$$

sendo os operadores $\tilde{A}(t)$ e $\tilde{B}(t)$

$$\tilde{A}(t) = \sigma_z, \quad (3.223)$$

$$\tilde{B}(t) = \sum_k g_k (e^{-i\omega_k t} b_k + e^{i\omega_k t} b_k^\dagger). \quad (3.224)$$

Com o uso as equações acima podemos notar as seguintes relações entre os operadores

$$A(\omega = 0) = \sigma_z, \quad (3.225)$$

$$B(\omega_k) = \sum_k g_k b_k, \quad (3.226)$$

$$B(-\omega_k) = \sum_k g_k b_k^\dagger. \quad (3.227)$$

Calculando os elementos da matriz decoerência do banho, presente na Eq. (3.125), ficamos com

$$\begin{aligned} \gamma_{\alpha\beta}(\omega_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \text{Tr}_R [\tilde{B}_\alpha(t) B_\beta(0) \rho_R] \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \langle \tilde{B}(t) B(0) \rangle = \begin{cases} 2\pi J(\omega_0) [1 + N(\omega_0)], & \text{para } \omega_0 > 0, \\ 2\pi J(|\omega_0|) N(|\omega_0|), & \text{para } \omega_0 < 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (3.228)$$

Como o operador do sistema existe somente para frequência zero, isto é, $A(0) = \sigma_z$, temos um problema ao calcular as taxas de decaimento, pois $B(\omega_0 = 0)$ não é bem definido. (3) Assim, podemos escrever a taxa de decaimento como

$$\gamma(0) = \lim_{\omega_0 \rightarrow 0} 2\pi \gamma(\omega_0) = \begin{cases} \lim_{\omega_0 \rightarrow 0^+} \gamma(\omega_0) = 2\pi J(\omega_0) [1 + N(\omega_0)], \\ \lim_{\omega_0 \rightarrow 0^-} \gamma(\omega_0) = 2\pi J(|\omega_0|) N(|\omega_0|). \end{cases} \quad (3.229)$$

Vemos dessa maneira que o limite não é bem definido, exceto no contexto de altas temperaturas, na qual vale a aproximação $1 + N(|\omega_0|) \approx N(|\omega_0|)$. (3, 55) Uma solução natural é impor que a densidade espectral $J(\omega_0)$ obedeça o limite

$$\lim_{\omega_0 \rightarrow 0} J(|\omega_0|) = 0, \quad (3.230)$$

⁹As populações do operador densidade são os termos $\rho_{11}(t)$ e $\rho_{22}(t)$, enquanto os termos fora da diagonal, $\rho_{12}(t)$ e $\rho_{21}(t)$, são chamados de coerências.

pois um modo com frequência nula não influencia o sistema. (3, 55) Como $J(\omega_0)$ deve tender a zero linearmente com a frequência ω_0 , resulta que $N(|\omega_0|)$ tende ao infinito como $1/|\omega_0|$ quando ω_0 decresce. (3) Estas suposições restringem assim as classes de densidades espectrais que podem ser empregadas no modelo de atenuação de fase, como por exemplo, as densidades espectrais ôhmicas. (77) Entretanto, isto não se torna um grande empecilho visto que o modelo é exatamente solucionável. (2) Então a matriz decoerência é definida como

$$\gamma(0) = 2\pi \lim_{\omega_0 \rightarrow 0} J(|\omega_0|)N(|\omega_0|). \quad (3.231)$$

Como $H_{LS} \propto \sigma_z \sigma_z = \mathbf{1}$, o termo de *Lamb-Shift* não contribui para a dinâmica e a equação mestra pode ser escrita como

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i \left[\frac{\omega_0}{2} \sigma_z, \rho_S(t) \right] + \gamma(0) [\sigma_z \rho_S(t) \sigma_z - \rho_S(t)], \quad (3.232)$$

na qual foi utilizado a relação

$$\frac{1}{2} \{ \sigma_z^2, \rho_S(t) \} = \frac{1}{2} \{ \mathbf{1}, \rho_S(t) \} = \rho_S(t). \quad (3.233)$$

4 EQUAÇÃO MESTRA ESTOCÁSTICA

Neste capítulo analisaremos a influência de campos estocásticos clássicos sobre a dinâmica de sistemas quânticos. (43, 44) Para tal tarefa, será utilizado o formalismo de função de onda estocástica (5), em que o estado de um sistema quântico aberto é descrito por um ensemble de estados puros (43)

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle\psi(t)|. \quad (4.1)$$

A dinâmica do sistema é obtida depois de realizarmos uma média sobre os processos estocásticos (43, 78)

$$\rho_S(t) = \langle\rho(t)\rangle, \quad (4.2)$$

em que a média do operador estocástico $\rho(t)$ coincide com o operador densidade do sistema $\rho_S(t)$. Porém, para calcular a evolução estocástica do operador densidade do sistema de interesse, o Hamiltoniano estocástico deve satisfazer algumas regras e propriedades que serão apresentadas a seguir. Os cálculos que serão apresentados se baseiam nas Refs. (43, 44, 79), sendo expostos para a construção de uma equação mestra estocástica. Para maiores informações e detalhes sobre a teoria de processos estocásticos clássicos e quânticos o leitor pode consultar as Refs. (2, 78)

4.1 O modelo Gaussiano de ruído

Considere um espaço de Hilbert \mathcal{H}_S que possui o seguinte Hamiltoniano

$$H = H_S + V(t), \quad (4.3)$$

em que H_S representa o Hamiltoniano do sistema e $V(t)$ um campo estocástico, sendo representado da seguinte maneira

$$V(t) = \sum_{\alpha} \xi_{\alpha}(t) V_{\alpha}, \quad (4.4)$$

em que V_{α} são operadores atuando no espaço de Hilbert do sistema e $\xi_{\alpha}(t)$ são variáveis estocásticas complexas. No caso vamos somente considerar os processos estocásticos

Gaussianos com média zero^a, isto é, tais processos satisfazem as seguintes propriedades

$$\langle \xi_\alpha(t) \rangle = 0, \quad (4.5)$$

$$\langle \xi_\alpha(t) \xi_\beta(t') \rangle = \langle \xi_\alpha^*(t) \xi_\beta^*(t') \rangle = 0, \quad (4.6)$$

$$\langle \xi_\alpha^*(t) \xi_\beta(t') \rangle \equiv \chi_{\alpha\beta}(t, t'). \quad (4.7)$$

Os processos que satisfazem as propriedades acima são chamados de processos Gaussianos e $\chi_{\alpha\beta}(t, t')$ é a função correlação. Além disso, como estamos trabalhando com evoluções físicas, os operadores $V(t)$ devem ser hermitianos. A evolução dinâmica do operador densidade se dá pela equação de Liouville-von-Neumann, na qual vamos considerar $\hbar = 1$

$$\frac{d}{dt} \rho_{\text{st}}(t) = -i [H_S + V(t), \rho_{\text{st}}(t)], \quad (4.8)$$

em que $\rho_{\text{st}}(t)$ representa o operador densidade resultante dos processos estocásticos. Escrevendo a Eq. (4.8) na representação de interação

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}_{\text{st}}(t) = -i [\tilde{V}(t), \tilde{\rho}_{\text{st}}(t)], \quad (4.9)$$

onde os termos apresentados são

$$\tilde{\rho}_{\text{st}}(t) = \tilde{U}(t, t') \tilde{\rho}_{\text{st}}(t') \tilde{U}^\dagger(t, t'), \quad (4.10)$$

$$\tilde{U}(t, t') = e^{iH_S t} U(t, t') e^{-iH_S t'}, \quad (4.11)$$

$$\tilde{V}(t) = \sum_\alpha \xi_\alpha(t) \tilde{V}_\alpha, \quad (4.12)$$

com $U(t, t')$ sendo o operador evolução temporal

$$U(t, t') = \mathcal{T} \left[e^{-i \int_{t'}^t du (H_S + V(u))} \right], \quad (4.13)$$

em que \mathcal{T} representa o operador ordenamento temporal. Conforme a Eq. (4.2), deve-se tomar a média sobre as realizações estocásticas na Eq. (4.9)

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}(t) = \frac{d}{dt} \langle \tilde{\rho}_{\text{st}}(t) \rangle = -i \left[\langle \tilde{V}(t) \tilde{\rho}_{\text{st}}(t) \rangle - \langle \tilde{\rho}_{\text{st}}(t) \tilde{V}(t) \rangle \right]. \quad (4.14)$$

^aOs momentos da distribuição são definidos como

$$\mu_n = \langle x^n \rangle = \sum_n x^n p(x),$$

em que $p(x)$ é a distribuição de probabilidade. Para o caso Gaussiano, os momentos se tornam

$$\mu_n = \begin{cases} \neq 0, & \text{para } n \text{ par,} \\ = 0, & \text{para } n \text{ ímpar.} \end{cases}$$

Os cumulantes da distribuição Gaussiana são então

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= \mu_1 = \langle x \rangle \\ \kappa_2 &= \mu_2 - \mu_1^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2. \end{aligned}$$

Para calcular os dois termos do lado direito da Eq. (4.14), devemos utilizar o teorema de Novikov. (80,81) Assim, a média de um operador de ruído $\xi(t)$ e um funcional $\mathcal{M}[\xi]$ é

$$\langle \xi(t) \mathcal{M}[\xi] \rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \int_0^t dt_1 \dots \int_0^t dt_n C_{n+1} \left\langle \frac{\delta \mathcal{M}[\xi]}{\delta \xi(t_1) \dots \delta \xi(t_n)} \right\rangle, \quad (4.15)$$

em que C_n são os cumulantes do ruído estocástico (82) e o último termo do lado direito é uma derivada funcional. (83) Como vamos considerar somente processos Gaussianos de média zero, o teorema de Novikov assume uma forma mais simplificada

$$\langle \xi(t) \mathcal{M}[\{\xi_\gamma(t)\}] \rangle = \sum_{\beta} \int_0^t dt' \langle \xi_\alpha(t) \xi_\beta^*(t') \rangle \left\langle \frac{\delta^n \mathcal{M}[\{\xi_\gamma(t)\}]}{\delta \xi_\beta^*(t')} \right\rangle, \quad (4.16)$$

onde \mathcal{M} é o funcional do conjunto $\{\xi_\gamma(t)\}$. Usando a Eq. (4.16) e a propriedade da hermiticidade de $V(t)$

$$V(t) = V^\dagger(t) \Leftrightarrow \sum_{\alpha} \xi_\alpha(t) V_\alpha = \sum_{\alpha} \xi_\alpha^*(t) V_\alpha^\dagger, \quad (4.17)$$

podemos encontrar uma forma de calcular as quantidades do lado direito da Eq. (4.14). Utilizando a Eq. (4.12) e a Eq. (4.16), temos

$$\begin{aligned} \langle \tilde{V}(t) \tilde{\rho}_{\text{st}}(t) \rangle &= \sum_{\alpha} \tilde{V}_\alpha^\dagger(t) \langle \xi_\alpha^*(t) \tilde{\rho}_{\text{st}}(t) \rangle \\ &= \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \langle \xi_\alpha(t) \xi_\beta^*(t') \rangle \tilde{V}_\alpha^\dagger(t) \left\langle \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t)}{\delta \xi_\beta(t')} \right\rangle \\ &= \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t, t') \tilde{V}_\alpha^\dagger(t) \left\langle \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t)}{\delta \xi_\beta(t')} \right\rangle, \end{aligned} \quad (4.18)$$

em que $\chi_{\alpha\beta}(t, t')$ é definido como

$$\chi_{\alpha\beta}(t, t') = \langle \xi_\alpha(t) \xi_\beta^*(t') \rangle. \quad (4.19)$$

O segundo termo do lado direito da Eq. (4.14) assume uma forma semelhante

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\rho}_{\text{st}}(t) \tilde{V}(t) \rangle &= \sum_{\alpha} \langle \xi_\alpha^*(t) \tilde{\rho}_{\text{st}}(t) \rangle \tilde{V}_\alpha^\dagger(t) \\ &= \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t, t') \left\langle \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t)}{\delta \xi_\beta(t')} \right\rangle \tilde{V}_\alpha^\dagger(t), \end{aligned} \quad (4.20)$$

e consequentemente a equação de Liouville-von-Neumann, Eq. (4.14), se torna

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\rho}(t) &= -i \left[\langle \tilde{V}(t) \tilde{\rho}_{\text{st}}(t) \rangle - \langle \tilde{\rho}_{\text{st}}(t) \tilde{V}(t) \rangle \right] \\ &= -i \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t, t') \tilde{V}_\alpha^\dagger(t) \left\langle \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t)}{\delta \xi_\beta(t')} \right\rangle + i \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t, t') \left\langle \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t)}{\delta \xi_\beta(t')} \right\rangle \tilde{V}_\alpha^\dagger(t) \\ &= -i \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t, t') \left[\tilde{V}_\alpha^\dagger(t) \left\langle \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t)}{\delta \xi_\beta(t')} \right\rangle - \left\langle \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t)}{\delta \xi_\beta(t')} \right\rangle \tilde{V}_\alpha^\dagger(t) \right] \\ &= -i \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t, t') \left[\tilde{V}_\alpha^\dagger(t), \left\langle \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t)}{\delta \xi_\beta(t')} \right\rangle \right]. \end{aligned} \quad (4.21)$$

A próxima tarefa a ser feita é calcular a derivada funcional presente no lado direito da Eq. (4.21). Para isso, será utilizada a equação de Liouville-von-Neumann na representação de interação, a Eq. (4.9), que por simples integração assume a forma

$$\tilde{\rho}_{\text{st}}(t) = \tilde{\rho}_{\text{st}}(0) - i \int_0^t d\tau \left[\tilde{V}(\tau), \tilde{\rho}_{\text{st}}(\tau) \right]. \quad (4.22)$$

Aplicando a derivada funcional, temos o seguinte resultado

$$\begin{aligned} \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t)}{\delta \xi_{\beta}(t')} &= \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(0)}{\delta \xi_{\beta}(t')} - i \int_0^t d\tau \frac{\delta}{\delta \xi_{\beta}(t')} \left[\tilde{V}(\tau), \tilde{\rho}_{\text{st}}(\tau) \right] \\ &= \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(0)}{\delta \xi_{\beta}(t')} - i \int_0^t d\tau \left\{ \left[\frac{\delta \tilde{V}(\tau)}{\delta \xi_{\beta}(t')}, \tilde{\rho}_{\text{st}}(\tau) \right] + \left[\tilde{V}(\tau), \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(\tau)}{\delta \xi_{\beta}(t')} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.23)$$

em que foi aplicada a regra da cadeia (83) para a derivada funcional. Assumindo que o estado inicial $\rho(0)$ não possui correlação, o primeiro termo do lado direito da Eq. (4.23) se torna nulo. Adicionalmente, suponha que $\tau < t'$, então devemos alterar o limite inferior de integração do terceiro termo, sendo o novo limite t' . Usando a propriedade (83)

$$\frac{\delta \xi_{\alpha}(\tau)}{\delta \xi_{\beta}(t')} = \delta_{\alpha\beta} \delta(\tau - t'), \quad (4.24)$$

o segundo termo do lado direito da Eq. (4.23) se torna

$$\frac{\delta \tilde{V}(\tau)}{\delta \xi_{\beta}(t')} = \frac{\delta \left[\sum_{\alpha} \tilde{V}_{\alpha}(\tau) \xi_{\beta}(t') \right]}{\delta \xi_{\beta}(t')} = \sum_{\alpha} \tilde{V}_{\alpha}(\tau) \frac{\delta \xi_{\alpha}(\tau)}{\delta \xi_{\beta}(t')} = \tilde{V}_{\beta}(\tau) \delta(\tau - t'). \quad (4.25)$$

Desta maneira, aplicando os resultados obtidos acima na Eq. (4.23), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t)}{\delta \xi_{\beta}(t')} &= -i \int_0^t d\tau \left\{ \left[\frac{\delta \tilde{V}(\tau)}{\delta \xi_{\beta}(t')}, \tilde{\rho}_{\text{st}}(\tau) \right] + \left[\tilde{V}(\tau), \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(\tau)}{\delta \xi_{\beta}(t')} \right] \right\} \\ &= -i \int_0^t d\tau \delta(\tau - t') \left[\tilde{V}_{\beta}(\tau), \tilde{\rho}_{\text{st}}(\tau) \right] - i \int_{t'}^t d\tau \left[\tilde{V}(\tau), \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(\tau)}{\delta \xi_{\beta}(t')} \right] \\ &= -i \left[\tilde{V}_{\beta}(t'), \tilde{\rho}_{\text{st}}(t') \right] - i \int_{t'}^t d\tau \left[\tilde{V}(\tau), \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(\tau)}{\delta \xi_{\beta}(t')} \right]. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Observe que para o tempo $t = t'$, temos a própria condição inicial

$$\frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t')}{\delta \xi_{\beta}(t')} = -i \left[\tilde{V}_{\beta}(t'), \tilde{\rho}_{\text{st}}(t') \right]. \quad (4.27)$$

Aplicando a derivada temporal na Eq. (4.26), ela assume a seguinte forma

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t)}{\delta \xi_{\beta}(t')} = -i \left[\tilde{V}(t), \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t)}{\delta \xi_{\beta}(t')} \right], \quad (4.28)$$

que é idêntica a equação de Liouville-von-Neumann, Eq. (4.9). Aplicando o resultado da Eq. (4.27), temos que a solução da Eq. (4.28) é

$$\begin{aligned} \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t)}{\delta \xi_{\beta}(t')} &= \tilde{U}(t, t') \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t')}{\delta \xi_{\beta}(t')} \tilde{U}^{\dagger}(t, t') \\ &= -i \tilde{U}(t, t') \left[\tilde{V}_{\beta}(t'), \tilde{\rho}_{\text{st}}(t') \right] \tilde{U}^{\dagger}(t, t'). \end{aligned} \quad (4.29)$$

Devido ao fato de $U(t, t')$ ser unitário, a dinâmica tem a propriedade de inversão temporal

$$\tilde{\rho}_{\text{st}}(t) = \tilde{U}(t, t') \tilde{\rho}_{\text{st}}(t') \tilde{U}^\dagger(t, t') \Leftrightarrow \tilde{\rho}_{\text{st}}(t') = \tilde{U}^\dagger(t, t') \tilde{\rho}_{\text{st}}(t) \tilde{U}(t, t'). \quad (4.30)$$

Sendo assim, podemos calcular o termo $\tilde{\rho}_{\text{st}}(t')$ da Eq. (4.29)

$$\begin{aligned} \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t)}{\delta \xi_\beta(t')} &= -i \tilde{U}(t, t') \left[\tilde{V}_\beta(t'), \tilde{\rho}_{\text{st}}(t') \right] \tilde{U}^\dagger(t, t') \\ &\quad - i \tilde{U}(t, t') \left[\tilde{V}_\beta(t'), \tilde{U}^\dagger(t, t') \tilde{\rho}_{\text{st}}(t) \tilde{U}(t, t') \right] \tilde{U}^\dagger(t, t') \\ &= -i \tilde{U}(t, t') \tilde{V}_\beta(t') \tilde{U}^\dagger(t, t') \tilde{\rho}_{\text{st}}(t) + i \tilde{\rho}_{\text{st}}(t) \tilde{U}(t, t') \tilde{V}_\beta(t') \tilde{U}^\dagger(t, t') \\ &= -i \left[\tilde{U}(t, t') \tilde{V}_\beta(t') \tilde{U}^\dagger(t, t'), \tilde{\rho}_{\text{st}}(t) \right]. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Conforme apresentado na seção 3.3, a descrição da equação mestra é válida somente para o caso de acoplamento fraco. Sendo assim, temos que impor novamente esta condição aqui, a fim de satisfazer a dinâmica física em questão. Tal condição se traduz matematicamente na imposição de manter apenas os termos de ordem zero no operador de evolução temporal, isto é, $\tilde{U}(t, t') \approx \mathbf{1}$. (84) A Eq. (4.31) se torna

$$\frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t)}{\delta \xi_\beta(t')} = -i \left[\tilde{V}_\beta(t'), \tilde{\rho}_{\text{st}}(t) \right]. \quad (4.32)$$

Aplicando a média sobre as realizações estocásticas na equação acima, temos

$$\left\langle \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t)}{\delta \xi_\beta(t')} \right\rangle = -i \left[\tilde{V}_\beta(t'), \tilde{\rho}(t) \right] \quad (4.33)$$

Substituindo o resultado na Eq. (4.21), obtemos a seguinte equação diferencial para o operador densidade do sistema

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\rho}(t) &= -i \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t, t') \left[\tilde{V}_\alpha^\dagger(t), \left\langle \frac{\delta \tilde{\rho}_{\text{st}}(t)}{\delta \xi_\beta(t')} \right\rangle \right] \\ &= - \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t, t') \left[\tilde{V}_\alpha^\dagger(t), \left[\tilde{V}_\beta(t'), \tilde{\rho}(t) \right] \right]. \end{aligned} \quad (4.34)$$

A próxima tarefa será calcular o comutador triplo do lado direito da equação. Para isso, faremos uso da seguinte propriedade matemática^b

$$2[A, [B, C]] = 2[[A, B], C] + \{\{A, B\}, C\} - 2(ACB + BCA). \quad (4.35)$$

Aplicando o resultado no comutador do lado direito da Eq. (4.34), temos

$$\begin{aligned} 2 \left[\tilde{V}_\alpha^\dagger(t), \left[\tilde{V}_\beta(t'), \tilde{\rho}(t) \right] \right] &= \left[\left[\tilde{V}_\alpha^\dagger(t), \tilde{V}_\beta(t') \right], \tilde{\rho}(t) \right] \\ &\quad + \left\{ \tilde{V}_\alpha^\dagger(t) \tilde{V}_\beta(t'), \tilde{\rho}(t) \right\} + \left\{ \tilde{V}_\beta(t') \tilde{V}_\alpha^\dagger(t), \tilde{\rho}(t) \right\} \\ &\quad - 2 \left[\tilde{V}_\alpha^\dagger(t) \tilde{\rho}(t) \tilde{V}_\beta(t') + \tilde{V}_\beta(t') \tilde{\rho}(t) \tilde{V}_\alpha^\dagger(t) \right]. \end{aligned} \quad (4.36)$$

^bEm que foi utilizado a identidade de Jacobi: $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$ e a relação $[A, [B, C]] + [B, [A, C]] = \{\{A, B\}, C\} - 2(ACB + BCA)$. (84)

Reescrevendo a Eq. (4.36) de modo a ela aparentar o termo não unitário da equação mestra apresentada no capítulo 3, temos

$$\begin{aligned} [\tilde{V}_\alpha^\dagger(t), [\tilde{V}_\beta(t'), \tilde{\rho}(t)]] &= \frac{1}{2} [[\tilde{V}_\alpha^\dagger(t), \tilde{V}_\beta(t')], \tilde{\rho}(t)] \\ &\quad - \tilde{V}_\alpha^\dagger(t) \tilde{\rho}(t) \tilde{V}_\beta(t') + \frac{1}{2} \{ \tilde{V}_\alpha^\dagger(t) \tilde{V}_\beta(t'), \tilde{\rho}(t) \} \\ &\quad - \tilde{V}_\beta(t') \tilde{\rho}(t) \tilde{V}_\alpha^\dagger(t) + \frac{1}{2} \{ \tilde{V}_\beta(t') \tilde{V}_\alpha^\dagger(t), \tilde{\rho}(t) \} \end{aligned} \quad (4.37)$$

Substituindo na Eq. (4.34), a equação mestra se torna

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\rho}(t) &= -i [H_{\text{EFF}}(t), \tilde{\rho}(t)] \\ &\quad + \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t, t') \left[\tilde{V}_\beta(t') \tilde{\rho}(t) \tilde{V}_\alpha^\dagger(t) - \frac{1}{2} \{ \tilde{V}_\alpha^\dagger(t) \tilde{V}_\beta(t'), \tilde{\rho}(t) \} \right] \\ &\quad + \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t, t') \left[\tilde{V}_\alpha^\dagger(t) \tilde{\rho}(t) \tilde{V}_\beta(t') - \frac{1}{2} \{ \tilde{V}_\beta(t') \tilde{V}_\alpha^\dagger(t), \tilde{\rho}(t) \} \right], \end{aligned} \quad (4.38)$$

em que o termo $H_{\text{EFF}}(t)$ é chamado de Hamiltoniano efetivo é definido como

$$H_{\text{EFF}}(t) \equiv -\frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t, t') [\tilde{V}_\alpha^\dagger(t), \tilde{V}_\beta(t')]. \quad (4.39)$$

Vale mencionar que o Hamiltoniano efetivo desempenha um papel semelhante ao termo de *Lamb-Shift*, apresentado na Eq. (3.132), no qual ele exerce apenas um deslocamento na energia do sistema. Ele é hermitiano, $H_{\text{EFF}}(t) = H_{\text{EFF}}^\dagger(t)$, dado o termo de interação $V(t)$ é hermitiano, isto é, para cada α existe um β tal que as propriedades $V_\alpha^\dagger = V_\beta$ e $\xi_\alpha^* = \xi_\beta$ sejam satisfeitas. Podemos então aplicar estas propriedades na Eq. (4.38) para o escrevermos os termos não unitários na mesma base. Assim,

$$\tilde{V}_\alpha^\dagger(t) \rightarrow \tilde{V}_\beta(t), \quad (4.40)$$

$$\tilde{V}_\beta(t) \rightarrow \tilde{V}_\alpha^\dagger(t), \quad (4.41)$$

$$\xi_\alpha^* \rightarrow \xi_\beta, \quad (4.42)$$

$$\xi_\beta \rightarrow \xi_\alpha^*. \quad (4.43)$$

Usando as transformações acima no terceiro termo da Eq. (4.38), obtemos as seguintes relações

$$\langle \xi_\alpha(t) \xi_\beta^*(t') \rangle \rightarrow \langle \xi_\alpha(t') \xi_\beta^*(t) \rangle \equiv \chi_{\alpha\beta}(t', t), \quad (4.44)$$

$$\tilde{V}_\alpha^\dagger(t) \tilde{\rho}(t) \tilde{V}_\beta(t') \rightarrow \tilde{V}_\beta^\dagger(t) \tilde{\rho}(t) \tilde{V}_\alpha(t'), \quad (4.45)$$

$$\frac{1}{2} \{ \tilde{V}_\beta(t') \tilde{V}_\alpha^\dagger(t), \tilde{\rho}(t) \} \rightarrow \frac{1}{2} \{ \tilde{V}_\alpha(t') \tilde{V}_\beta^\dagger(t), \tilde{\rho}(t) \}. \quad (4.46)$$

Assim podemos reescrever a Eq. (4.38)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\tilde{\rho}(t) &= -i [H_{\text{EFF}}(t), \tilde{\rho}(t)] \\ &+ \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t, t') \left[\tilde{V}_\beta(t') \tilde{\rho}(t) \tilde{V}_\alpha^\dagger(t) - \frac{1}{2} \{ \tilde{V}_\alpha^\dagger(t) \tilde{V}_\beta(t'), \tilde{\rho}(t) \} \right] \\ &+ \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t', t) \left[\tilde{V}_\beta(t) \tilde{\rho}(t) \tilde{V}_\alpha^\dagger(t') - \frac{1}{2} \{ \tilde{V}_\alpha^\dagger(t') \tilde{V}_\beta(t), \tilde{\rho}(t) \} \right]. \end{aligned} \quad (4.47)$$

Assumindo que o sistema possui um espectro de energia discreto, podemos escrever os operadores $\tilde{V}_\alpha^\dagger(t)$ e $\tilde{V}_\beta(t)$ na representação de interação

$$\tilde{V}_\alpha^\dagger(t) = \sum_{\omega'} e^{i\omega't} V_\alpha^\dagger(\omega'), \quad (4.48)$$

$$\tilde{V}_\beta(t) = \sum_{\omega} e^{-i\omega t} V_\beta(\omega). \quad (4.49)$$

Substituindo na Eq. (4.47), ficamos com

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\tilde{\rho}(t) &= -i [H_{\text{EFF}}(t), \tilde{\rho}(t)] + \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t, t') \left[\sum_{\omega} e^{-i\omega t'} V_\beta(\omega) \tilde{\rho}(t) \sum_{\omega'} e^{i\omega' t} V_\alpha^\dagger(\omega') \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \left\{ \sum_{\omega'} e^{i\omega' t} V_\alpha^\dagger(\omega') \sum_{\omega} e^{-i\omega t'} V_\beta(\omega), \tilde{\rho}(t) \right\} \right] \\ &+ \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t', t) \left[\sum_{\omega} e^{-i\omega t} V_\beta(\omega) \tilde{\rho}(t) \sum_{\omega'} e^{i\omega' t'} V_\alpha^\dagger(\omega') \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \left\{ \sum_{\omega'} e^{i\omega' t'} V_\alpha^\dagger(\omega') \sum_{\omega} e^{-i\omega t} V_\beta(\omega), \tilde{\rho}(t) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (4.50)$$

Colocando os termos das exponenciais em evidência

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\tilde{\rho}(t) &= -i [H_{\text{EFF}}(t), \tilde{\rho}(t)] \\ &+ \sum_{\alpha, \beta, \omega, \omega'} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t, t') e^{i(-\omega t' + \omega' t)} \left[V_\beta(\omega) \tilde{\rho}(t) V_\alpha^\dagger(\omega') - \frac{1}{2} \{ V_\alpha^\dagger(\omega') V_\beta(\omega), \tilde{\rho}(t) \} \right] \\ &+ \sum_{\alpha, \beta, \omega, \omega'} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t', t) e^{i(-\omega t + \omega' t')} \left[V_\beta(\omega) \tilde{\rho}(t) V_\alpha^\dagger(\omega') - \frac{1}{2} \{ V_\alpha^\dagger(\omega') V_\beta(\omega), \tilde{\rho}(t) \} \right]. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Fazendo a translação temporal $t' \rightarrow t - \tau$ e conseqüentemente $dt' = -d\tau$, então

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\tilde{\rho}(t) &= -i [H_{\text{EFF}}(t), \tilde{\rho}(t)] \\ &+ \sum_{\alpha, \beta, \omega, \omega'} \int_0^t d\tau \left[\chi_{\alpha\beta}(t, t - \tau) e^{i(\omega' - \omega)t} e^{i\omega\tau} + \chi_{\alpha\beta}(t - \tau, t) e^{i(\omega' + \omega)t} e^{-i\omega'\tau} \right] \times \\ &\quad \times \left[V_\beta(\omega) \tilde{\rho}(t) V_\alpha^\dagger(\omega') - \frac{1}{2} \{ V_\alpha^\dagger(\omega') V_\beta(\omega), \tilde{\rho}(t) \} \right]. \end{aligned} \quad (4.52)$$

De forma equivalente ao que foi apresentado na Sec. 3.3.2, vamos aplicar a aproximação secular em que somente os termos de frequências iguais, $\omega = \omega'$, sobrevivem. Desta forma,

a equação mestra se torna

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\rho}(t) &= -i [H_{\text{EFF}}(t), \tilde{\rho}(t)] + \sum_{\alpha, \beta, \omega} \int_0^t d\tau [\chi_{\alpha\beta}(t, t-\tau) e^{i\omega\tau} + \chi_{\alpha\beta}(t-\tau, t) e^{-i\omega\tau}] \times \\ &\times \left[V_\beta(\omega) \tilde{\rho}(t) V_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \{V_\alpha^\dagger(\omega) V_\beta(\omega), \tilde{\rho}(t)\} \right], \end{aligned} \quad (4.53)$$

em que definimos

$$\eta_{\alpha\beta\omega}(t) \equiv \int_0^t d\tau [\chi_{\alpha\beta}(t, t-\tau) e^{i\omega\tau} + \chi_{\alpha\beta}(t-\tau, t) e^{-i\omega\tau}]. \quad (4.54)$$

Com esta aproximação e utilizando as Eqs. (4.48) e (4.49), o termo do Hamiltoniano efetivo, $H_{\text{EFF}}(t)$, se torna

$$\begin{aligned} H_{\text{EFF}}(t) &= -\frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t, t') [\tilde{V}_\alpha^\dagger(t'), \tilde{V}_\beta(t')] \\ &= -\frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t, t') \left[\sum_{\omega'} e^{-i\omega t'} \tilde{V}_\alpha^\dagger(\omega), \sum_{\omega} e^{-i\omega t'} \tilde{V}_\beta(\omega) \right] \\ &= -\frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t, t') \sum_{\omega'} e^{-i\omega t'} \sum_{\omega} e^{-i\omega t'} [\tilde{V}_\alpha^\dagger(\omega), \tilde{V}_\beta(\omega)] \\ &= -\frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta, \omega} \int_0^t dt' e^{i\omega(t-t')} \chi_{\alpha\beta}(t, t') [V_\alpha^\dagger(\omega), V_\beta(\omega)]. \end{aligned} \quad (4.55)$$

A equação mestra presente na Eq. (4.53) pode ser então escrita como

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho(t) &= -i [H_{\text{EFF}}(t), \rho(t)] \\ &+ \sum_{\alpha, \beta, \omega} \eta_{\alpha\beta\omega}(t) \left[V_\beta(\omega) \rho(t) V_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \{V_\alpha^\dagger(\omega) V_\beta(\omega), \rho(t)\} \right]. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Retornando a Eq. (4.56) para a representação de Schrödinger, obtemos finalmente a equação mestra do sistema

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_S(t) &= -i [H_S + H_{\text{EFF}}(t), \rho_S(t)] \\ &+ \sum_{\alpha, \beta, \omega} \eta_{\alpha\beta\omega}(t) \left[V_\beta(\omega) \rho_S(t) V_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \{V_\alpha^\dagger(\omega) V_\beta(\omega), \rho_S(t)\} \right]. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Semelhante à dedução da equação mestra apresentada na Sec. 3.3, temos que os coeficientes $\eta_{\alpha\beta\omega}(t)$ representam as taxas de decaimento do sistema devido a interação do mesmo com o bombeio estocástico clássico, induzindo assim decoerência no sistema. O termo $H_{\text{EFF}}(t)$ é chamado de Hamiltoniano efetivo e é definido como

$$\begin{aligned} H_{\text{EFF}}(t) &= -\frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta} \int_0^t dt' \chi_{\alpha\beta}(t, t') [\tilde{V}_\alpha^\dagger(t'), \tilde{V}_\beta(t')] \\ &= -\frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta, \omega} \int_0^t dt' e^{i\omega(t-t')} \chi_{\alpha\beta}(t, t') [V_\alpha^\dagger(\omega), V_\beta(\omega)], \end{aligned} \quad (4.58)$$

sendo $\chi_{\alpha\beta}(t, t')$ a função correlação para processos estocásticos Gaussianos e $\tilde{V}_\alpha^\dagger(t)$ e $\tilde{V}_\beta(t')$ os operadores do bombeio estocástico clássico. De forma análoga a apresentada na Sec. 3.3 temos que $[H_S, H_{\text{EFF}}(t)] = 0$, fazendo com que o primeiro termo da Eq. (4.57) represente apenas um deslocamento nos níveis de energia do sistema, podendo ser ignorado pois estamos interessado somente na dinâmica do sistema. Adaptando a relação obtida na Eq. (3.135) para o caso do bombeio estocástico

$$[H_S, V_\alpha(\omega)] = -\omega V_\alpha(\omega), \quad (4.59)$$

$$[H_S, V_\alpha^\dagger(\omega)] = \omega V_\alpha^\dagger(\omega), \quad (4.60)$$

$$(4.61)$$

obtemos a seguinte relação de comutação

$$\begin{aligned} [H_S, [V_\alpha^\dagger(\omega), V_\beta(\omega)]] &= [H_S, V_\alpha^\dagger(\omega)V_\beta(\omega) - V_\beta(\omega)V_\alpha^\dagger(\omega)] \\ &= [H_S, V_\alpha^\dagger(\omega)V_\beta(\omega)] - [H_S, V_\beta(\omega)V_\alpha^\dagger(\omega)] \\ &= [H_S, V_\alpha^\dagger(\omega)]V_\beta(\omega) + V_\alpha^\dagger(\omega)[H_S, V_\beta(\omega)] - [H_S, V_\beta(\omega)]V_\alpha^\dagger(\omega) - V_\beta(\omega)[H_S, V_\alpha^\dagger(\omega)] \\ &= \omega V_\alpha^\dagger(\omega)V_\beta(\omega) - \omega V_\alpha^\dagger(\omega)V_\beta(\omega) + \omega V_\beta(\omega)V_\alpha^\dagger(\omega) - \omega V_\beta(\omega)V_\alpha^\dagger(\omega) = 0. \end{aligned} \quad (4.62)$$

Assim, a relação de comutação entre os Hamiltonianos do sistema e efetivo é

$$[H_S, H_{\text{EFF}}(t)] = -\frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta, \omega} \int_0^t dt' e^{i\omega(t-t')} \chi_{\alpha\beta}(t, t') [H_S, [V_\alpha^\dagger(\omega), V_\beta(\omega)]] = 0. \quad (4.63)$$

Vale ressaltar que foram utilizados processos Gaussianos pois desta forma é possível aplicarmos o teorema de Novikov. (83, 85)

4.2 Evolução conjunta

Nesta seção vamos somente apresentar o resultado da combinação das equações mestras referente ao banho térmico e o bombeio estocástico clássico. A demonstração detalhada da dinâmica conjunta pode ser vista na Sec. 6.2.3. Assim, somando-se a equação referente ao reservatório térmico, Eq. (3.139), e a equação referente ao processo estocástico, Eq. (4.57), temos a dinâmica combinada. Escolhendo a mesma base para os operadores de interação do sistema com o banho e os processos estocásticos, isto é, $A_\alpha(\omega) = V_\alpha(\omega)$, tem-se

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_S(t) &= -i [H_S + H_{\text{LS}} + H_{\text{EFF}}(t), \rho_S(t)] \\ &\quad + \sum_{\alpha, \beta, \omega} \gamma_{\alpha\beta\omega}(t) \left[V_\beta(\omega) \rho_S(t) V_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \{ V_\alpha^\dagger(\omega) V_\beta(\omega), \rho_S(t) \} \right], \end{aligned} \quad (4.64)$$

em que $\gamma_{\alpha\beta\omega}(t) = \eta_{\alpha\beta\omega}(t) + \gamma_{\alpha\beta}(t)$ representa a perda das propriedades quânticas do sistema tanto devido ao bombeio estocástico como pelo reservatório térmico. Conforme será apresentado na Sec. 5.3.3, se a equação mestra estiver escrita em uma base canônica,

seus coeficientes $\gamma_{\alpha\beta\omega}(t)$ podem ser usados como uma medida de não Markovianidade. Enfatizamos este fato, pois esta medida será utilizada na Sec. 6.2.3 para mostrarmos como a não Markovianidade é gerada através de um bombeio estocástico clássico.

4.3 Exemplos

4.3.1 Atenuação de amplitude

Como primeiro exemplo, vamos aplicar as ferramentas matemáticas desenvolvidas na Sec. 4.1 e construir a equação mestra desejada. Considere um q-bit sobre a ação de um bombeio estocástico $V(t)$ com frequência ω . Assim, o Hamiltoniano do modelo pode ser escrito como

$$\begin{aligned} H(t) &= H_S + V(t) \\ &= \frac{\omega_0}{2}\sigma_z + i \left[e^{-i\omega t} u(t) \sigma_+ - e^{i\omega t} u^*(t) \sigma_- \right], \end{aligned} \quad (4.65)$$

em que ω_0 é a frequência do sistema, σ_+ e σ_- são operadores criação e destruição do sistema, σ_z é a matriz de Pauli, $\sigma_{\pm} = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$ (51) e $u(t)$, $u^*(t)$ são ruídos Gaussianos com média zero. Trabalhando com o termo de bombeio

$$V(t) = i \left[e^{-i\omega t} u(t) \sigma_+ - e^{i\omega t} u^*(t) \sigma_- \right] \equiv \xi_1(t) V_1 + \xi_2(t) V_2, \quad (4.66)$$

sendo

$$\xi_1(t) = e^{-i\omega t} u(t), \quad (4.67)$$

$$\xi_2(t) = e^{i\omega t} u^*(t). \quad (4.68)$$

Escrevendo o termo $V(t)$ na representação de interação

$$\tilde{V}(t) = \xi_1(t) \tilde{V}_1(t) + \xi_2(t) \tilde{V}_2(t), \quad (4.69)$$

na qual os operadores acima são definidos como

$$\tilde{V}_1(t) = e^{i\omega_0 t} \sigma_+, \quad (4.70)$$

$$\tilde{V}_2(t) = e^{-i\omega_0 t} \sigma_-. \quad (4.71)$$

Observando as equações acima podemos determinar as relações

$$V_1(\omega_0) = 0, \quad V_2(\omega_0) = \sigma_-, \quad (4.72)$$

$$V_1(-\omega_0) = \sigma_+, \quad V_2(-\omega_0) = 0. \quad (4.73)$$

Lembrando a definição da correlação $\chi_{\alpha\beta}(t, t')$, estas se tornam

$$\chi_{\alpha\beta}(t, t') = \langle \xi_{\alpha}^*(t), \xi_{\beta}(t') \rangle, \quad (4.74)$$

$$\chi_{11}(t, t') = e^{i\omega(t-t')} \langle u^*(t) u(t') \rangle, \quad (4.75)$$

$$\chi_{12}(t, t') = e^{i\omega(t+t')} \langle u^*(t) u^*(t') \rangle, \quad (4.76)$$

$$\chi_{21}(t, t') = e^{-i\omega(t+t')} \langle u(t) u(t') \rangle, \quad (4.77)$$

$$\chi_{22}(t, t') = e^{-i\omega(t-t')} \langle u(t) u^*(t') \rangle. \quad (4.78)$$

Lembrando da Eq. (4.6)

$$\langle \xi_\alpha(t) \xi_\beta(t') \rangle = 0, \quad (4.79)$$

$$\langle \xi_\alpha^*(t) \xi_\beta^*(t') \rangle = 0. \quad (4.80)$$

Assim, os únicos termos remanescentes serão

$$\chi_{11}(t, t') = e^{i\omega(t-t')} \langle u^*(t) u(t') \rangle, \quad (4.81)$$

$$\chi_{22}(t, t') = e^{-i\omega(t-t')} \langle u(t) u^*(t') \rangle. \quad (4.82)$$

Assumindo que as funções de correlação são homogêneas no tempo, isto é, elas só dependem da diferença de tempo de $t - t'$. As correlações então podem ser escritas como $\langle u^*(t) u(t') \rangle = \langle u(t) u^*(t') \rangle = S(\tau)$, em que $\tau = t - t'$. Assim, as taxas de decaimento (coeficientes da equação mestra) são

$$\eta_{\alpha\beta\omega_0}(t) = \int_0^t d\tau \left[\chi_{\alpha\beta}(\tau) e^{i\omega_0\tau} + \chi_{\alpha\beta}(-\tau) e^{-i\omega_0\tau} \right], \quad (4.83)$$

$$\begin{aligned} \eta_{1,1,\omega_0}(t) &= \int_0^t d\tau \left[\chi_{11}(\tau) e^{i\omega_0\tau} + \chi_{11}(-\tau) e^{-i\omega_0\tau} \right] \\ &= \int_0^t d\tau S(\tau) \left(e^{i\omega\tau} e^{i\omega_0\tau} + e^{-i\omega\tau} e^{-i\omega_0\tau} \right) \\ &= 2 \int_0^t d\tau S(\tau) \cos[(\omega + \omega_0)\tau]. \end{aligned} \quad (4.84)$$

De forma equivalente para o termo $(\alpha = 1, \beta = 1, -\omega_0)$ ^c

$$\begin{aligned} \eta_{1,1,-\omega_0}(t) &= \int_0^t d\tau \left[\chi_{11}(\tau) e^{-i\omega_0\tau} + \chi_{11}(-\tau) e^{i\omega_0\tau} \right] \\ &= \int_0^t d\tau S(\tau) \left(e^{i\omega\tau} e^{-i\omega_0\tau} + e^{-i\omega\tau} e^{i\omega_0\tau} \right) \\ &= 2 \int_0^t d\tau S(\tau) \cos(\Delta\omega\tau) \\ &\equiv \eta(t), \end{aligned} \quad (4.85)$$

em que $\Delta\omega = \omega - \omega_0$. Para o termo $(\alpha = 2, \beta = 2, \omega_0)$

$$\begin{aligned} \eta_{2,2,\omega_0}(t) &= \int_0^t d\tau \left[\chi_{22}(\tau) e^{i\omega_0\tau} + \chi_{22}(-\tau) e^{-i\omega_0\tau} \right] \\ &= \int_0^t d\tau S(\tau) \left(e^{-i\omega\tau} e^{i\omega_0\tau} + e^{i\omega\tau} e^{-i\omega_0\tau} \right) \\ &= 2 \int_0^t d\tau S(\tau) \cos(\Delta\omega\tau) \\ &\equiv \eta(t). \end{aligned} \quad (4.86)$$

^cA seguir fica claro o porque definimos o termo $\eta(t)$ apenas para os casos em que $(\alpha = 1, \beta = 1, -\omega_0)$ e $(\alpha = 2, \beta = 2, \omega_0)$. *Spoiler*: pois somente estes termos estão associados aos operadores $V_k(\omega_0)$ não nulos na construção do Lindbladiano.

E para o termo $(\alpha = 2, \beta = 2, -\omega_0)$

$$\begin{aligned}\eta_{2,2,-\omega_0}(t) &= \int_0^t d\tau \left[\chi_{22}(\tau) e^{-i\omega_0\tau} + \chi_{22}(-\tau) e^{i\omega_0\tau} \right] \\ &= \int_0^t d\tau S(\tau) \left(e^{-i\omega\tau} e^{-i\omega_0\tau} + e^{i\omega\tau} e^{i\omega_0\tau} \right) \\ &= 2 \int_0^t d\tau S(\tau) \cos [(\omega + \omega_0) \tau].\end{aligned}\quad (4.87)$$

Por fim, devemos calcular o termo do Hamiltoniano efetivo, presente na Eq. (4.55)

$$H_{\text{EFF}}(t) = -\frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta, \omega} \int_0^t dt' e^{i\omega(t-t')} \chi_{\alpha\beta}(t, t') \left[V_\alpha^\dagger(\omega), V_\beta(\omega) \right]. \quad (4.88)$$

Usando as Eqs. (4.70) e (4.71) podemos calcular os comutadores do lado direito da equação

$$\begin{aligned}[\tilde{V}_1^\dagger(t), \tilde{V}_1(t')] &= e^{-i\omega_0(t-t')} [\sigma_-, \sigma_+] \\ &= -e^{-i\omega_0(t-t')} \sigma_z,\end{aligned}\quad (4.89)$$

$$[\tilde{V}_1^\dagger(t), \tilde{V}_2(t')] = e^{-i\omega_0(t+t')} [\sigma_-, \sigma_-] = 0, \quad (4.90)$$

$$[\tilde{V}_2^\dagger(t), \tilde{V}_1(t')] = e^{i\omega_0(t+t')} [\sigma_+, \sigma_+] = 0, \quad (4.91)$$

$$\begin{aligned}[\tilde{V}_2^\dagger(t), \tilde{V}_2(t')] &= e^{i\omega_0(t-t')} [\sigma_+, \sigma_-] \\ &= e^{i\omega_0(t-t')} \sigma_z.\end{aligned}\quad (4.92)$$

O Hamiltoniano efetivo é então escrito como

$$\begin{aligned}H_{\text{EFF}}(t) &= -\frac{i}{2} \int_0^t dt' \left\{ \chi_{11}(t, t') [\tilde{V}_1^\dagger(t), \tilde{V}_1(t')] + \chi_{22}(t, t') [\tilde{V}_2^\dagger(t), \tilde{V}_2(t')] \right\} \\ &= -\frac{i}{2} \int_0^t dt' \left[-\chi_{11}(t, t') e^{-i\omega_0(t-t')} + \chi_{22}(t, t') e^{i\omega_0(t-t')} \right] \sigma_z \\ &= -\frac{i}{2} \int_0^t dt' \left[-e^{i\omega(t-t')} e^{-i\omega_0(t-t')} \langle u^*(t) u(t') \rangle + e^{-i\omega(t-t')} e^{i\omega_0(t-t')} \langle u(t) u^*(t') \rangle \right] \sigma_z \\ &= -\frac{i}{2} \int_t^0 (-d\tau) S(\tau) \left[-e^{i(\omega-\omega_0)\tau} + e^{-i(\omega-\omega_0)\tau} \right] \sigma_z \\ &= \int_t^0 d\tau S(\tau) \sin(\Delta\omega\tau) \sigma_z \\ &= -\int_0^t d\tau S(\tau) \sin(\Delta\omega\tau) \sigma_z \\ &\equiv \frac{-\Pi(t)}{2} \sigma_z,\end{aligned}\quad (4.93)$$

em que usamos a transformação temporal $\tau = t - t'$ e $\Delta\omega = \omega - \omega_0$. Todavia, lembrando das Eqs. (4.72) e (4.73), vemos que os termos $V_1(\omega_0) = V_2(-\omega_0) = 0$, restando assim apenas os termos proporcionais a $(\alpha = 1, \beta = 1, -\omega_0)$ e $(\alpha = 2, \beta = 2, \omega_0)$ no Lindbladiano. Aplicando os resultados obtidos na Eq. (4.57), obtemos a equação mestra desejada

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \rho_S(t) &= -i \left[(\omega_0 - \Pi(t)) \frac{\sigma_z}{2}, \rho_S(t) \right] + \eta(t) \left[\sigma_+ \rho_S(t) \sigma_- - \frac{1}{2} \{ \sigma_- \sigma_+, \rho_S(t) \} \right] \\ &\quad + \eta(t) \left[\sigma_- \rho_S(t) \sigma_+ - \frac{1}{2} \{ \sigma_+ \sigma_-, \rho_S(t) \} \right]\end{aligned}\quad (4.94)$$

4.3.2 Oscilador harmônico

O próximo exemplo é o caso de um oscilador harmônico sobre a influência de um bombeio estocástico com frequência ω . (44, 86) Seu Hamiltoniano é escrito como

$$\begin{aligned} H(t) &= H_S + V(t) \\ &= \omega_0 a^\dagger a + \left[e^{-i\omega t} u(t) a^\dagger - e^{i\omega t} u^*(t) a \right], \end{aligned} \quad (4.95)$$

na qual ω_0 é a frequência do sistema, a e a^\dagger são operadores criação e destruição do sistema e $u(t)$, $u^*(t)$ são ruídos Gaussianos com média zero. Trabalhando com o termo do bombeio estocástico

$$V(t) = \left[e^{-i\omega t} u(t) a^\dagger - e^{i\omega t} u^*(t) a \right] \equiv \xi_1(t) V_1 + \xi_2(t) V_2. \quad (4.96)$$

É possível observar que o exemplo atual é equivalente ao exemplo da atenuação de amplitude, conforme apresentado na Sec. 4.3.1. Bastando fazermos a seguinte transformação para adaptarmos os resultados obtidos neste modelo

$$\sigma_+ \rightarrow a^\dagger, \quad (4.97)$$

$$\sigma_- \rightarrow a. \quad (4.98)$$

Escrevendo o termo do ruído na representação de interação

$$\tilde{V}(t) = \xi_1(t) \tilde{V}_1(t) + \xi_2(t) \tilde{V}_2(t), \quad (4.99)$$

em que os operadores $\xi_k(t)$ e $V_k(t)$ são

$$\xi_1(t) = e^{-i\omega t} u(t), \quad (4.100)$$

$$\xi_2(t) = e^{i\omega t} u^*(t), \quad (4.101)$$

$$V_1(t) = e^{i\omega_0 t} a^\dagger, \quad (4.102)$$

$$V_2(t) = e^{-i\omega_0 t} a. \quad (4.103)$$

Com as Eqs. (4.102) e (4.103) podemos escrever os operadores $V_k(\omega_0)$ como

$$V_1(\omega_0) = 0, \quad V_2(\omega_0) = a, \quad (4.104)$$

$$V_1(-\omega_0) = a^\dagger, \quad V_2(\omega_0) = 0. \quad (4.105)$$

Com isso temos que somente os termos $(\alpha = 1, \beta = 1, -\omega_0)$ e $(\alpha = 2, \beta = 2, \omega_0)$ são diferentes de zero no Lindbladiano. Como os operadores $\xi_k(t)$ são iguais, as taxas de decaimento da equação mestra (coeficientes da equação mestra) também são idêntico as Eqs. (4.85) e (4.86)

$$\eta_{1,1,-\omega_0}(t) = 2 \int_0^t d\tau S(\tau) \cos(\Delta\omega\tau) \equiv \eta(t), \quad (4.106)$$

$$\eta_{2,2,\omega_0}(t) = 2 \int_0^t d\tau S(\tau) \cos(\Delta\omega\tau) \equiv \eta(t), \quad (4.107)$$

em que $\Delta\omega = \omega - \omega_0$. Como a relação de comutação neste caso muda, temos que adaptar o Hamiltoniano efetivo

$$[\sigma_+, \sigma_-] = \sigma_z \rightarrow [a, a^\dagger] = \mathbf{1}, \quad (4.108)$$

$$\begin{aligned} [\tilde{V}_1^\dagger(t), \tilde{V}_1(t')] &= e^{-i\omega_0(t-t')} [a, a^\dagger] \\ &= -e^{-i\omega_0(t-t')} \mathbf{1}, \end{aligned} \quad (4.109)$$

$$[\tilde{V}_1^\dagger(t), \tilde{V}_2(t')] = e^{-i\omega_0(t+t')} [a, a] = 0, \quad (4.110)$$

$$[\tilde{V}_2^\dagger(t), \tilde{V}_1(t')] = e^{i\omega_0(t+t')} [a^\dagger, a^\dagger] = 0, \quad (4.111)$$

$$\begin{aligned} [\tilde{V}_2^\dagger(t), \tilde{V}_2(t')] &= e^{i\omega_0(t-t')} [a^\dagger, a] \\ &= -e^{i\omega_0(t-t')} \mathbf{1}. \end{aligned} \quad (4.112)$$

O Hamiltoniano efetivo é então

$$\begin{aligned} H_{\text{EFF}}(t) &= -\frac{i}{2} \int_0^t dt' \left\{ \chi_{11}(t, t') [\tilde{V}_1^\dagger(t), \tilde{V}_1(t')] + \chi_{22}(t, t') [\tilde{V}_2^\dagger(t), \tilde{V}_2(t')] \right\} \\ &= -\frac{i}{2} \int_t^0 (-d\tau) S(\tau) \left[e^{i(\omega-\omega_0)\tau} - e^{-i(\omega-\omega_0)\tau} \right] \mathbf{1} \\ &= -\int_t^0 d\tau S(\tau) \sin(\Delta\omega\tau) \mathbf{1} \\ &= \int_0^t d\tau S(\tau) \sin(\Delta\omega\tau) \mathbf{1} \\ &\equiv \frac{\Pi(t)}{2} \mathbf{1}, \end{aligned} \quad (4.113)$$

em que usamos a transformação temporal $\tau = t - t'$ e $\Delta\omega = \omega - \omega_0$. Entretanto, como o Hamiltoniano efetivo é proporcional ao operador identidade, $[H_{\text{EFF}}(t), \rho_S(t)] = 0$, não contribuindo dessa forma para a dinâmica do sistema. A equação mestra do modelo se torna

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_S(t) &= -i [\omega_0 a^\dagger a, \rho_S(t)] + \eta(t) \left[a^\dagger \rho_S(t) a - \frac{1}{2} \{a a^\dagger, \rho_S(t)\} \right] \\ &\quad + \eta(t) \left[a \rho_S(t) a^\dagger - \frac{1}{2} \{a^\dagger a, \rho_S(t)\} \right]. \end{aligned} \quad (4.114)$$

4.3.3 Atenuação de fase

Outro exemplo apresentado é uma atenuação de fase. O Hamiltoniano que descreve o modelo é

$$\begin{aligned} H(t) &= H_S + V(t) \\ &= \frac{\omega_0}{2} \sigma_z + u(t) \sigma_z, \end{aligned} \quad (4.115)$$

Escrevendo o termo do ruído estocástico

$$V(t) = u(t) \sigma_z \equiv \xi(t) V, \quad (4.116)$$

em que $\xi(t) = u(t)$. De forma equivalente a Sec. 3.4.3, o modelo apresenta uma solução exata. Todavia, como $V(t)$ possui somente um termo $u(t)$ este deve ser real, isto é, $u(t) \in \mathbb{R}$. Ainda, como a relação de comutação entre o Hamiltoniano do sistema e o termo de bombeio estocástico é

$$[H_S, V(t)] = \frac{\omega_0}{2} u(t) [\sigma_z, \sigma_z] = 0, \quad (4.117)$$

o termo $V(t)$ não evolui no tempo e sua representação de interação possui o vínculo $\tilde{V}(t) = V(t)$ e $V(\omega = 0) = \sigma_z$. Assumindo novamente que as correlações são homogêneas no tempo $\langle u^*(t)u(t') \rangle = \langle u(t)u^*(t') \rangle = S(\tau)$, o coeficiente da equação mestra é

$$\begin{aligned} \eta_0(t) &= \int_0^t d\tau [\chi(t, t') e^{i\omega_0\tau} + \chi(t', t) e^{-i\omega_0\tau}] \\ &= \int_0^t d\tau [\langle u^*(t)u(t') \rangle e^{i\omega_0\tau} + \langle u(t)u^*(t') \rangle e^{-i\omega_0\tau}] \\ &= \int_0^t d\tau S(\tau) \cos(\omega_0\tau). \end{aligned} \quad (4.118)$$

Como a relação de comutação do operador $\tilde{V}(t) = V(t)$ é

$$[V^\dagger(t), V(t')] = [\sigma_z, \sigma_z] = 0, \quad (4.119)$$

o Hamiltoniano efetivo é nulo, $H_{\text{EFF}}(t) = 0$. Assim, a equação mestra pode ser escrita como

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -i \left[\frac{\omega_0}{2} \sigma_z, \rho_S(t) \right] + \eta_0(t) [\sigma_z \rho_S(t) \sigma_z - \rho_S(t)], \quad (4.120)$$

em que usamos o fato

$$\frac{1}{2} \{ \sigma_z^2, \rho_S(t) \} = \frac{1}{2} \{ \mathbf{1}, \rho_S(t) \} = \rho_S(t). \quad (4.121)$$

5 MARKOVIANIDADE QUÂNTICA

Neste capítulo serão discutidos algumas das principais definições de Markovianidade, tanto no contexto clássico como quântico. Além disso, serão apresentadas algumas medidas de não Markovianidade quântica presentes na literatura. (3, 17) Mais detalhes acerca de processos Markovianos podem ser consultados na Ref. (87)

5.1 Markovianidade clássica

5.1.1 Definição

Um processo estocástico nada mais é do que uma família de variáveis aleatórias que evoluem no tempo, isto é, $\{X(t), t \in T \subset \mathbb{R}\}$. Com isso em mente, podemos definir um processo Markoviano (17)

Definição 3 (Processo Markoviano) *Um processo estocástico $\{X(t), t \in T\}$ é dito ser Markoviano se a probabilidade da variável aleatória X assumir um valor x_n para um tempo t_n , sendo que para um tempo anterior t_{n-1} ela assumiu um valor x_{n-1} , na qual as probabilidades de escolha dos valores possíveis de X não são afetados para tempos anteriores a t_{n-1} . Esta definição pode ser formulada em termos das probabilidades condicionais*

$$P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_0, t_0) = P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}), \quad (5.1)$$

em que $\{t_n \geq t_{n-1} \geq \dots \geq t_0\}$. Em outras palavras, um processo Markoviano é um processo na qual seu estado futuro depende somente do estado atual, não possuindo assim efeitos de memória dos valores passados da variável aleatória X .

Considere um processo Markoviano em que $P(x_3, t_3 | x_2, t_2; x_1, t_1) = P(x_3, t_3 | x_2, t_2)$, em que $t_3 > t_2 > t_1$ são três tempos consecutivos. Usando a definição da probabilidade condicional

$$P(x_3, t_3 | x_2, t_2; x_1, t_1) \equiv \frac{P(x_3, t_3; x_2, t_2; x_1, t_1)}{P(x_2, t_2; x_1, t_1)}, \quad (5.2)$$

temos que

$$\begin{aligned} P(x_3, t_3; x_2, t_2; x_1, t_1) &= P(x_3, t_3 | x_2, t_2; x_1, t_1) P(x_2, t_2; x_1, t_1) \\ &= P(x_3, t_3 | x_2, t_2) P(x_2, t_2 | x_1, t_1) P(x_1, t_1). \end{aligned} \quad (5.3)$$

Fazendo a soma sobre x_2 e dividindo ambos os lados por $P(x_1, t_1)$, resulta na equação de Chapman-Kolmogorov (17)

$$P(x_3, t_3 | x_1, t_1) = \sum_{x_2} P(x_3, t_3 | x_2, t_2) P(x_2, t_2 | x_1, t_1). \quad (5.4)$$

Ainda podemos relacionar a Eq. (5.4) com o seguinte teorema (17)

Teorema 4 *Uma família de probabilidades condicionais $P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1})$ satisfazendo a Eq. (5.4) pode ser considerada como uma probabilidade condicional de um processo Markoviano, na qual $t_n > t_{n-1}$.*

A prova do teorema acima pode ser encontrada na Ref. (17)

5.1.2 Matriz de transição

Vamos agora mostrar que existe uma relação direta das probabilidades condicionais da equação de Chapman-Kolmogorov, Eq. (5.4), com a chamada matriz de transição. No caso dos processos Markovianos podemos escrever

$$T(x_2, t_2 | x_1, t_1) = P(x_2, t_2 | x_1, t_1), \quad (5.5)$$

em que $T(x_2, t_2 | x_1, t_1)$ é chamado de matriz de transição ou propagador. (2,17) O propagador pode ser interpretado simplesmente como uma transição de um estado x_1 no tempo t_1 para o estado x_2 no tempo t_2 . (2) Entretanto, para processos não Markovianos a Eq. (5.5) não é satisfeita, pois $P(x_2, t_2 | x_1, t_1)$ depende dos valores que a variável aleatória assume para tempos anteriores a t_1 . (17) Assim, como os processos Markovianos não possuem efeitos de memória, a Eq. (5.5) sempre é satisfeita.

Considere uma matriz de transição $T(x_2, t_2 | x_1, t_1)$ que relaciona a probabilidade da variável aleatória X nos tempos t_1 e t_2

$$P(x_2, t_2) = \sum_{X_1} T(x_2, t_2 | x_1, t_1) P(x_1, t_1). \quad (5.6)$$

Devido ao fato que $\sum_{x_2} P(x_2, t_2) = 1$ e $P(x_2, t_2) \geq 0$, temos

$$\sum_{x_2} T(x_2, t_2 | x_1, t_1) = 1, \quad (5.7)$$

$$T(x_2, t_2 | x_1, t_1) \geq 0. \quad (5.8)$$

Assim, as matrizes que satisfazem as propriedades descritas acima, são chamadas de matrizes estocásticas. (17)

Com as Eqs. (5.4) e (5.5), podemos reescrever as condições de normalização, positividade e a equação de Chapman-Kolmogorov para um processo Markoviano. Observe o corolário a seguir (17)

Corolário 1 *Seja $\{X(t), t \in T\}$ um processo Markoviano. Então a matriz de transição satisfaz as propriedades*

$$\sum_{x_2} T(x_2, t_2 | x_1, t_1) = 1, \quad (5.9)$$

$$T(x_2, t_2 | x_1, t_1) \geq 0, \quad (5.10)$$

$$T(x_3, t_3 | x_1, t_1) = \sum_{x_2} T(x_3, t_3 | x_2, t_2) T(x_2, t_2 | x_1, t_1), \quad (5.11)$$

em que $t_3 \geq t_2 \geq t_1$.

A Eq. (5.11) também é chamada de equação de Chapman-Kolmogorov e pode ser interpretada como o processo se inicia no estado x_1 no tempo t_1 e então evolui para o estado x_3 no tempo t_3 , passando em algum estado intermediário x_2 no tempo t_2 . (2) Assim, a probabilidade do estado transicionar de $(x_1, t_1) \rightarrow (x_3, t_3)$ pode ser escrita como uma composição da probabilidade de transição de $(x_1, t_1) \rightarrow (x_2, t_2)$ e $(x_2, t_2) \rightarrow (x_3, t_3)$, onde foi somado todas as possibilidades de estados intermediários x_2 . (2)

Existe também uma relação entre processos Markovianos e divisíveis. Assim, podemos enunciar a seguinte definição (17)

Definição 4 (Processo divisível) *A matriz de transição de um processo estocástico $\{X(t), t \in T\}$, que satisfaz as Eqs. (5.9), (5.10) e (5.11) é dita ser divisível.*

Entretanto, existem processos divisíveis que são não Markovianos (17). Para deixar um pouco mais clara esta ideia, vamos apresentar um exemplo deste caso (17, 78, 88). Seja $\{X(t), t \in T\}$ um processo estocástico, tal que $X(t) = \{0, 1\}$ e três tempos $t_3 > t_2 > t_1$. Definindo a probabilidade conjunta

$$P(x_3, t_3; x_2, t_2; x_1, t_1) = \frac{1}{4} (\delta_{x_3,0} \delta_{x_2,0} \delta_{x_1,1} + \delta_{x_3,0} \delta_{x_2,1} \delta_{x_1,0} + \delta_{x_3,1} \delta_{x_2,0} \delta_{x_1,0} + \delta_{x_3,1} \delta_{x_2,1} \delta_{x_1,1}). \quad (5.12)$$

Calculando as probabilidades marginais $P(x_3, t_3; x_2, t_2) = P(x_2, t_2; x_1, t_1) = 1/4$. Assim, temos

$$\begin{aligned} P(x_3, t_3 | x_2, t_2; x_1, t_1) &= \frac{P(x_3, t_3; x_2, t_2; x_1, t_1)}{P(x_2, t_2; x_1, t_1)} \\ &= \delta_{x_3,0} \delta_{x_2,0} \delta_{x_1,1} + \delta_{x_3,0} \delta_{x_2,1} \delta_{x_1,0} + \delta_{x_3,1} \delta_{x_2,0} \delta_{x_1,0} + \delta_{x_3,1} \delta_{x_2,1} \delta_{x_1,1}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Como $P(1, t_3 | 0, t_2; 0, t_1) = 1$ e $P(1, t_3 | 0, t_2; 1, t_1) = 0$, o processo é dito ser não Markoviano. Todavia, as matrizes de transição são

$$T(x_3, t_3 | x_2, t_2) = \frac{P(x_3, t_3; x_2, t_2)}{P(x_2, t_2)} = \frac{1}{2}, \quad (5.14)$$

e de forma análoga, $T(x_2, t_2 | x_1, t_1) = T(x_3, t_3 | x_1, t_1) = 1/2$, que mostra que as condições impostas nas Eqs. (5.9), (5.10) e (5.11) são satisfeitas. Assim, o processo é dito ser divisível, porém não Markoviano. Outros exemplos de processos divisíveis e não Markovianos podem ser encontrados nas Refs. (89–91)

Por fim, mostraremos um resultado útil que relaciona a norma- L_1 com a matriz de transição de um processo Markoviano. Primeiramente lembrando que a norma- L_1 para um vetor qualquer $v(x)$ é definida como

$$\|v(x)\|_1 := \sum_x |v(x)|. \quad (5.15)$$

Assim, para uma matriz de transição temos o teorema conforme segue (17)

Teorema 5 *Considere $T(x_2, t_2|x_1, t_1), t_2 > t_1$ uma matriz de transição de um processo estocástico qualquer. Tal processo pode ser considerado divisível se, e somente se, a norma- L_1 não aumenta quando $T(x_2, t_2|x_1, t_1)$ é aplicado ao vetor $v(x)$*

$$\left\| \sum_{x_1} T(x_2, t_2|x_1, t_1)v(x_1) \right\|_1 \leq \|v(x_2)\|_1 = \sum_{x_2} |v(x_2)|. \quad (5.16)$$

A prova do teorema se encontra na Ref. (17) A norma- L_1 de um dado vetor $v(x)$ se torna útil, pois ela é capaz distinguir corretamente duas distribuições de probabilidade (17)

$$\|v(x)\|_1 = \|qp_1(x) - (1 - q)p_2(x)\|_1, \quad (5.17)$$

em que q e $1 - q$ são as probabilidades de uma certa variável aleatória X ser distribuída pelas probabilidades $p_1(x)$ e $p_2(x)$, respectivamente. No caso em que as distribuições são igualmente prováveis, $q = 1/2$, temos

$$\|v(x)\|_1 = \frac{1}{2} \|p_1(x) - p_2(x)\|_1, \quad (5.18)$$

conhecida como distância de Kolmogorov, distância- L_1 ou distância variacional. (17) Conforme veremos na seção a seguir, ela serve de base para a medida de não Markovianidade quântica, chamada de distância de traço.

5.2 Markovianidade quântica

Para o caso quântico, as definições de Markovianidade se tornam mais complexas, visto que a própria mecânica quântica possui certas regras e postulados próprios. Antes de apresentar as definições da Markovianidade quântica, serão enunciadas algumas importantes definições que serão úteis ao longo desta tese. Seja $\mathcal{E}_A : L(\mathcal{H}_A) \rightarrow L(\mathcal{H}_A)$ um mapa CPTP e $\rho(t_0) \in L(\mathcal{H}_A)$ um operador densidade, então a evolução dinâmica se dá por

$$\mathcal{E}_{(t_1, t_0)}[\rho(t_0)] = \sum_k p_k \mathcal{E}_{(t_1, t_0)}[|k\rangle \langle k|], \quad (5.19)$$

em que $\{|k\rangle\}_{k=1, \dots, d}$ é uma base do espaço de Hilbert. Considere que a evolução dinâmica pode ser composta da seguinte forma de mapas dinâmicos

$$\mathcal{E}_{(t_3, t_1)} = \mathcal{E}_{(t_3, t_2)} \mathcal{E}_{(t_2, t_1)}, \quad \text{com } t_3 \geq t_2 \geq t_1. \quad (5.20)$$

Assim, podemos formular a seguinte definição geral de processo P-divisível (17)

Definição 5 (Processo P-divisível) *Um sistema quântico sob a ação de mapas lineares que preservam o traço $\{\mathcal{E}_{(t_2, t_1)}, t_2 \geq t_1 \geq t_0\}$ é dito ser P-divisível se, para qualquer t_2 e t_1 , $\mathcal{E}_{(t_2, t_1)}$ é um mapa positivo e satisfaz a Eq. (5.20).*

Além disso, vamos enunciar outra definição necessária para a construção das definições de Markovianidade, a distância de traço

Definição 6 (Distância de traço) *Considere dois estados quânticos ρ_1 e ρ_2 , então a distância de traço entre os dois estados é definida como*

$$D(\rho_1, \rho_2) = \frac{1}{2} \|\rho_1 - \rho_2\|_1, \quad (5.21)$$

sendo $\|X\|_1 = \text{Tr}\sqrt{X^\dagger X}$ a norma traço. Assim as definições de Markovianidade podem ser enunciadas de forma adequada. Vale destacar que há várias definições sobre não Markovianidade na literatura, conforme podem ser vistas nas Refs. (2, 3, 6) Serão apresentadas apenas as duas definições mais conhecidas, a Rivas, Huelga, e Plenio (RHP) (19) e a Breuer, Lane e Piilo (BLP) (45, 52)

Definição 7 (Definição RHP) *Seja um sistema quântico sujeito à dinâmica de uma família de mapas lineares que preservam o traço, $\{\mathcal{E}_{(t_2, t_1)}, t_2 \geq t_1 \geq t_0\}$. Tal sistema é dito ser Markoviano, ou simplesmente divisível (92), se para cada t_1 e t_2 , $\mathcal{E}_{(t_2, t_1)}$ é um mapa completamente positivo e satisfaz a Eq. (5.20).*

Outros três importantes teoremas sobre processos quânticos Markovianos serão enunciados a seguir, sendo o primeiro importante para demonstrar as diferenças entre as definições de Markovianidade RHP e BLP, e os dois últimos importantes para a definição da medida de Andersson, Cresser, Hall e Li (ACHL) de não Markovianidade, que será apresentada posteriormente na seção 5.3.3. Assim sendo, temos

Teorema 6 *Uma evolução quântica $\{\mathcal{E}_{(t_2, t_1)}, t_2 \geq t_1 \geq t_0\}$ é Markoviana se, e somente se, para todo t_2 e t_1 , com $t_2 \geq t_1$,*

$$\left\| \left[\mathcal{E}_{(t_2, t_1)} \otimes \mathbf{1}_B \right] (X) \right\|_1 \leq \|X\|_1, \quad (5.22)$$

para qualquer operador Hermitiano $X \in L(\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B)$. (17)

Como para um processo quântico Markoviano $\mathcal{E}_{(t_2, t_1)}$ é completamente positivo para qualquer $t_2 \geq t_1$, assim o mapa $\mathcal{E}_{(t_2, t_1)} \otimes \mathbf{1}_B$ é positivo. O processo de demonstração pode ser consultado na Ref. (17) O próximo teorema é enunciado conforme abaixo

Teorema 7 (Gorini-Kossakowski-Susarshan-Lindblad) *Um operador \mathcal{L}_t é o gerador de um processo quântico Markoviano (ou divisível) se, e somente se, ele puder ser escrito na seguinte forma*

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \mathcal{L}_t[\rho(t)] = -i[H(t), \rho(t)] + \sum_k \gamma_k(t) \left[V_k(t) \rho(t) V_k^\dagger(t) - \frac{1}{2} \{V_k(t) V_k^\dagger(t), \rho(t)\} \right], \quad (5.23)$$

onde $H(t)$ e $V(t)$ são operadores dependentes do tempo, e $\gamma_k(t) \geq 0$ são chamados de coeficientes da equação mestra.

Tais coeficientes $\gamma_k(t)$ serão melhor explorados no capítulo 6. O teorema acima foi desenvolvido por Kossakowski e coautores (64, 93) e independentemente por Lindblad. (94) Por fim o terceiro teorema trata acerca dos coeficientes da equação mestra, que conforme será visto na seção 5.3.3, pode ser usada como medida de não Markovianidade. Considere que a Eq. (5.23) esteja escrita em uma base canônica ortogonal, então

Teorema 8 *A dinâmica gerada pela Eq. (5.23) é*

(i) *CP-divisível se, e somente se $\gamma_k(t) > 0$, para um dado k e $t \geq 0$.*

(ii) *P-divisível se*

$$\sum_k \gamma_k(t) |\langle m | V_k(t) | n \rangle|^2 \geq 0. \quad (5.24)$$

para $m \neq n, t \geq 0$ e uma base ortonormal $\{|n\rangle\}$ do espaço de Hilbert. (95)

Os teoremas 7 e 8 são importantes pois através deles podem-se construir uma medida que foi utilizada para medir o quanto de não Markovianidade um sistema produz devido a injeção de um bombeio estocástico no mesmo. Os resultados estão presentes no capítulo 6.

A outra definição de Markovianidade, chamada BLP, se baseia no comportamento monotônico decrescente da distância de traço, em outras palavras, na perda de informação de estados quânticos para o ambiente. (42, 45) Se por ventura a distância de traço apresentar um aumento em seu valor, isto indica de que alguma forma parte da informação está retornando ao sistema.

Definição 8 (Definição BLP) *Uma evolução quântica dada por um mapa dinâmico $\mathcal{E}_{(t_2, t_1)}$, é Markoviana se a distância de traço entre dois estados iniciais ρ_1 e ρ_2 decair monotonicamente com o tempo.*

Conforme visto no teorema 6, para uma dinâmica Markoviana $\mathcal{E}_{(t, t_0)}$ e um operador Hermitiano $X \in L(\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B)$, a quantidade $\| [\mathcal{E}_{(t, t_0)} \otimes \mathbf{1}_B](X) \|_1$ decai monotonicamente com o tempo, pois a norma traço do mapa dinâmico $\mathcal{E}_{t, t_0} \otimes \mathbf{1}_B$ atuando no operador X sempre é menor ou igual a norma traço de X . Assim, $\| \mathcal{E}_{(t, t_0)}(X) \|_1$ também se comporta da mesma maneira. Escolhendo então o caso em que $X = (\rho_1 - \rho_2)/2$, temos

$$\| \mathcal{E}_{(t_2, t_0)}(X) \|_1 \leq \| \mathcal{E}_{(t_1, t_0)}(X) \|_1, \quad t_2 \geq t_1, \quad (5.25)$$

que se reduz na própria definição BLP

$$\| \rho_1(t_2) - \rho_2(t_2) \|_1 \leq \| \rho_1(t_1) - \rho_2(t_1) \|_1. \quad (5.26)$$

A distância de traço é monotonicamente decrescente para canais quânticos e também para mapas CP-divisíveis. Assim, a dinâmica Markoviana RHP também é considerada Markoviana BLP, não sendo verdade o caminho inverso. (17, 40, 96, 97) Seja $X \in L(\mathcal{H})$

um operador hermitiano e $\mathcal{E}_{(t,t_0)} \in L^2(\mathcal{H})$ um mapa dinâmico. Tal mapa é P-divisível se, e somente se, a norma traço é monotonicamente decrescente

$$\frac{d}{dt} \left\| \mathcal{E}_{(t,t_0)}(X) \right\|_1 \leq 0. \quad (5.27)$$

Escolhendo $X = \rho_1 - \rho_2$, que também é hermitiano, temos que para mapas inversíveis^a, a P-divisibilidade é conforme a equação abaixo

$$\frac{d}{dt} \left\| \mathcal{E}_{(t,t_0)}(\rho_1 - \rho_2) \right\|_1 \leq 0. \quad (5.29)$$

Mapas inversíveis são Markovianos BLP se, e somente se, eles forem P-divisíveis (95, 98). Como a definição de um processo Markoviano RHP está associada com a propriedade do mapa ser CP-divisível (definição 7), e este ser um caso especial de um mapa P-divisível, toda dinâmica Markoviana RHP também é BLP, não valendo a afirmativa inversa. (17, 40, 96, 97) No contexto da dinâmica não Markoviana o cenário se inverte, pois a não Markovianidade BLP é um caso especial da não Markovianidade RHP.

Conforme apresentado, processos Markovianos RHP e BLP estão associados com mapas CP-divisíveis e P-divisíveis, respectivamente. Assim, do ponto de vista do teorema 8, para termos uma dinâmica Markoviana RHP todos os coeficientes da equação mestra devem ser positivos, enquanto que para a BLP temos que a soma de todos os coeficientes deve ser positiva. Para processos não Markovianos RHP, basta que apenas um dos coeficientes deve ser negativo, enquanto que para a BLP a soma deles deve ser negativa. Este fato será explorado no Cap. 6.

Outras formalizações e discussões acerca da não Markovianidade quântica podem ser encontradas na Ref. (99)

5.3 Medidas de não Markovianidade

Nesta seção apresentaremos algumas das principais medidas de não Markovianidade presentes na literatura. Entretanto, vale ressaltar que hoje existem inúmeras medidas que podem encontradas nas Refs. (17, 19–21, 40, 41, 45, 46, 100–103)

5.3.1 Medida Rivas, Huelga e Plenio (RHP)

Os resultados apresentados nesta seção são baseados na Ref. (17), sendo reproduzidos por clareza de exposição. Conforme visto na seção 5.2, a definição de Markovianidade proposta se baseia na divisibilidade do mapa dinâmico quântico. Assumindo um mapa

^aUm mapas \mathcal{E} é dito ser inversível se vale a relação

$$\mathcal{E}_{(t_3,t_1)} = \mathcal{E}_{(t_3,t_2)}\mathcal{E}_{(t_2,t_1)} \Leftrightarrow \mathcal{E}_{(t_3,t_2)} = \mathcal{E}_{(t_3,t_1)}\mathcal{E}_{(t_2,t_1)}^{-1}, \quad (5.28)$$

em que $t_3 > t_2 > t_1$.

CP-divisível da seguinte maneira

$$\mathcal{E}_{(t_2,t_0)} = \mathcal{E}_{(t_2,t_1)} \mathcal{E}_{(t_1,t_0)} \iff \mathcal{E}_{(t_2,t_1)} = \mathcal{E}_{(t_2,t_0)} \mathcal{E}_{(t_1,t_0)}^{-1}, \quad \text{com } t_2 \geq t_1 \geq t_0, \quad (5.30)$$

a ideia desta medida é quantificar o quanto a dinâmica intermediária, $\mathcal{E}_{(t_2,t_1)}$, deixa de ser CP. (17) Assim, podemos construir uma medida de não Markovianidade.

Seja $|\Phi\rangle$ o estado maximamente emaranhado entre duas cópias do nosso sistema, em que

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{n=0}^{d-1} |n\rangle |n\rangle. \quad (5.31)$$

Desta maneira, conforme a definição 2 o mapa admite uma matriz de Choi da forma

$$\left[\mathcal{E}_{(t_2,t_1)} \otimes \mathbf{1}_B \right] (|\Phi\rangle \langle \Phi|). \quad (5.32)$$

O teorema de Choi nos assegura que $\mathcal{E}_{(t_2,t_1)}$ é completamente positivo se, e somente se, a matriz da Eq. (5.32) é positiva semidefinida, ou seja, $\left[\mathcal{E}_{(t_2,t_1)} \otimes \mathbf{1}_B \right] (|\Phi\rangle \langle \Phi|) \geq 0$. Como $\mathcal{E}_{(t_2,t_1)}$ também preserva o traço, a norma traço da Eq. (5.32) nos fornece uma medida de $\mathcal{E}_{(t_2,t_1)}$ não CP. Sendo assim,

$$\left\| \left[\mathcal{E}_{(t_2,t_1)} \otimes \mathbf{1}_B \right] (|\Phi\rangle \langle \Phi|) \right\|_1 \begin{cases} = 1, & \text{se } \mathcal{E}_{(t_2,t_1)} \text{ é CP,} \\ > 1, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (5.33)$$

em que para a igualdade temos um processo divisível e o caso abaixo quando o processo é não divisível. Podemos então definir a medida de não Markovianidade como (19)

$$g(t) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{\left\| \left[\mathcal{E}_{(t+\epsilon,t)} \otimes \mathbf{1}_B \right] (|\Phi\rangle \langle \Phi|) \right\|_1 - 1}{\epsilon}, \quad (5.34)$$

onde para dinâmicas não Markovianas, a medida se torna $g(t) > 0$. Desta maneira, o total de não Markovianidade presente em um intervalo de tempo $t \in I$ é calculado segundo a equação

$$\mathcal{N}_{RHP}^I(t) := \int_I g(t) dt. \quad (5.35)$$

Exemplos em que a medida RHP é estudada para qbits acoplados a um banho bosônico podem ser encontrados nas Refs. (40, 104–109), para qbits acoplados a sistemas de dimensão d (110, 111) e para dinâmicas estocásticas clássicas. (91)

5.3.2 Medida Breuer, Lane e Pilo (BLP)

Conforme visto na definição 8, a definição da medida de não Markovianidade proposta pelos pesquisadores baseia-se na evolução temporal da distância de traço entre dois estados iniciais, descrevendo sua distinguibilidade. A medida então conecta a não monotonia da distância de traço com o retorno de parte da informação ao sistema em questão, sendo que, para mapas CPTP a distinguibilidade entre dois estados decai

continuamente com o passar do tempo. Dito isto, podemos definir o fluxo de informação $\sigma(\rho_1, \rho_2, t)$ como

$$\sigma(\rho_1, \rho_2, t) = \frac{d}{dt} D[\rho_1(t), \rho_2(t)] \leq 0, \quad (5.36)$$

em que

$$D[\rho_1(t), \rho_2(t)] = \frac{1}{2} \|\rho_1(t) - \rho_2(t)\|_1, \quad (5.37)$$

sendo $\|X\|_1 = \text{Tr}\sqrt{X^\dagger X}$ e $\rho_j(t)$ $|j = 1, 2$ o operador evoluído sobre a influência de um mapa dinâmico divisível $\Phi_t : \rho_0 \rightarrow \rho(t)$. Quando ocorre o retorno de informação ao sistema, temos que $\sigma(\rho_1, \rho_2, t) > 0$. (42) A medida BLP é então calculada da seguinte maneira (42, 45)

$$\mathcal{N}_{BLP}(\Phi_t) = \max_{\rho_1, \rho_2} \int_{\sigma > 0} \sigma(\rho_1, \rho_2, t) dt, \quad (5.38)$$

em que a integral é calculada em todos os intervalos em que o fluxo de informação é positivo, incluindo uma maximização sobre todos os pares de estados iniciais do sistema. Conforme visto anteriormente, como nem todo processo não Markoviano RHP é dito ser não Markoviano BLP, a medida BLP é simplesmente uma testemunha para processos não Markovianos RHP. (17)

Para deixar as ideias um pouco mais claras, vamos apresentar um exemplo do uso da medida BLP, presente na Ref. (17) Considere a equação mestra de um q-bit

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = \gamma(t) [\sigma_z \rho(t) \sigma_z - \rho(t)]. \quad (5.39)$$

Reescrevendo a Eq. (5.39), temos

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \rho_{11}(t) & \rho_{12}(t) \\ \rho_{21}(t) & \rho_{22}(t) \end{bmatrix} = \gamma(t) \begin{bmatrix} 0 & -2\rho_{12}(t) \\ -2\rho_{21}(t) & 0 \end{bmatrix}. \quad (5.40)$$

Escolhendo a condição inicial

$$\rho(0) = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix}, \quad (5.41)$$

e integrando a equação

$$\rho(t) = \mathcal{E}_{t,0}[\rho(0)] = \begin{bmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} R(t) \\ \rho_{21} R(t) & \rho_{22} \end{bmatrix}, \quad \text{com } R(t) = \exp \left[-2 \int_0^t \gamma(s) ds \right]. \quad (5.42)$$

Escolhendo dois estados iniciais

$$\rho_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \rho_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.43)$$

a distância de traço é

$$\begin{aligned} D[\rho_1(t), \rho_2(t)] &= \frac{1}{2} \|\rho_1(t) - \rho_2(t)\|_1 = \left\| \begin{bmatrix} 0 & R(t) \\ R(t) & 0 \end{bmatrix} \right\|_1 \\ &= |R(t)| = R(t). \end{aligned} \quad (5.44)$$

Então,

$$\sigma(\rho_1, \rho_2, t) = \frac{d}{dt} D[\rho_1(t), \rho_2(t)] = -2\gamma(t)R(t). \quad (5.45)$$

Como $0 \leq R(t) \leq 1$, $\sigma(\rho_1, \rho_2, t)$ assume valores positivos quando $\gamma(t) < 0$, gerando uma dinâmica não Markoviana.

Exemplos do uso da distância de traço como medida de não Markovianidade (ou testemunha) pode ser encontradas para dinâmicas de q-bits (40, 104–109, 112–118), sistemas de q-trits acoplados a um banho bosônico. (119) e q-bits acoplados a outros sistemas de dimensão finitas (27, 110, 120)

5.3.3 Medida Andersson, Cresser, Hall e Li (ACHL)

Segundo o teorema 8, a dinâmica gerada por um processo quântico Markoviano é CP-divisível e consequentemente RHP Markoviano, se todos os coeficientes da equação mestra, $\gamma_k(t)$ forem positivos. Assim Andersson, Cresser, Hall e Li (ACHL) definiram uma medida de não Markovianidade baseada na negatividade destes coeficientes. (46) Para cada coeficiente, temos

$$f_k(t) = \max[0, -\gamma_k(t)] = \frac{1}{2} [|\gamma_k(t)| - \gamma_k(t)], \quad (5.46)$$

que é nula para evoluções Markovianas ($\gamma_k(t) > 0$) e igual ao seu valor absoluto para coeficientes negativos. A contribuição total é definida como

$$f(t) = \sum_k f_k(t), \quad (5.47)$$

e por fim temos a definição da medida ACHL

$$\mathcal{N}_{ACHL}^I(t) = \int_I f(t) dt, \quad (5.48)$$

onde I é um intervalo de tempo. Um fato importante a ser mencionado é que tanto a medida RHP como ACHL, possuem um vínculo simples entre elas e sua demonstração pode ser encontrada na Ref. (46), sendo o vínculo dado por

$$\mathcal{N}_{ACHL}^I(t) = \frac{d}{2} \mathcal{N}_{RHP}^I(t), \quad (5.49)$$

em que d é a dimensão do espaço de Hilbert.

Exemplos do uso da medida RHP podem ser vistos nas Refs. (17, 46, 121)

5.3.4 Volume de Bloch

Outra medida de não Markovianidade foi proposta pelos pesquisadores Lorenza, Plastina e Paternostro (122) baseada no volume da esfera de Bloch e apresenta uma

interpretação geométrica. Nela, os autores expandem o estado ρ nas bases $\{G_k\}_{k=0}^{d^2-1}$ em que $G_0 = \mathbf{1}/\sqrt{d}$. Assim, o estado se torna

$$\rho = \frac{\mathbf{1}}{d} + \sum_{k=1}^{d^2-1} r_k G_k, \quad \text{com } r_k = \text{Tr}(G_k \rho). \quad (5.50)$$

O vetor de Bloch $\mathbf{r} = (r_1, \dots, r_{d^2-1})^T$ é transformado pela ação de um mapa dinâmico

$$\rho(t) = \mathcal{E}_{(t,t_0)}(\rho) \longleftrightarrow \mathbf{r}_t = \mathbf{M}_{(t,t_0)} \mathbf{r}_{t_0} + \mathbf{c}_{(t,t_0)}, \quad (5.51)$$

em que

$$[\mathbf{M}_{(t,t_0)}]_{ij} = \text{Tr}[G_i \mathcal{E}_{(t,t_0)}(G_j)], \quad (5.52)$$

e também

$$[\mathbf{c}_{(t,t_0)}]_i = \frac{1}{d} \text{Tr}[G_i \mathcal{E}_{(t,t_0)}(\mathbf{1})], \quad (5.53)$$

em que $i, j > 0$. Caso o mapa $\mathcal{E}_{(t,t_0)}$ seja uma composição de mapas CP, o valor absoluto do determinante da matriz $\mathbf{M}_{(t,t_0)}$ decai monotonicamente em função do tempo. (92) Assim, $|\det[\mathbf{M}_{(t,t_0)}]|$ descreve a mudança no volume do conjunto de estados acessíveis (122), reduzindo o volume dos estados para uma dinâmica Markoviana.

Alguns exemplos do uso da medida do volume de Bloch podem ser consultados nas Refs. (17, 122–125)

6 NÃO MARKOVIANIDADE PRODUZIDA POR RUÍDOS ESTOCÁSTICOS CLÁSSICOS

Neste capítulo vamos apresentar os resultados obtidos de um trabalho desenvolvido. (16) Nele, basicamente utilizou-se um sistema de um q-bit em contato com um reservatório bosônico e adicionalmente foi introduzido um bombeio estocástico clássico no sistema. A partir disso, foi utilizada uma medida de não Markovianidade para mostrar que o bombeio possibilita o aparecimento da não Markovianidade no sistema. Na seção 6.2 será calculada a dinâmica do sistema referente ao contato com o reservatório. Na seção 6.2.2 será estudada a influência de um ruído estocástico sobre um sistema quântico. Por fim, na seção 6.2.3 vamos mostrar como a dinâmica do sistema se comporta sob o efeito de ambos os processos combinados, alterando suas características, conforme mencionado anteriormente.

6.1 Evolução conjunta

Nesta seção apresentaremos como a dinâmica do sistema é afetada pela interação do mesmo com o banho bosônico e o bombeio estocástico, simultaneamente. Sejam \mathcal{H}_S e \mathcal{H}_R os espaços de Hilbert do sistema e do banho, respectivamente, de modo que a combinação de ambos nos leva a $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_R$. Assim, podemos escrever o Hamiltoniano total como

$$H(t) = H_S + H_R + H_{\text{int}} + V(t), \quad (6.1)$$

em que H_{int} e $V(t)$ representam os Hamiltonianos de interação sistema-reservatório térmico e do bombeio estocástico, respectivamente. Lembrando suas definições, presentes nas Eqs. (3.45) e (4.4), temos

$$H_{\text{int}}(t) = \sum_n A_n \otimes B_n, \quad (6.2)$$

$$V(t) = \sum_\alpha \xi_\alpha(t) V_\alpha, \quad (6.3)$$

sendo A_n e V_α operadores atuando no espaço de Hilbert do sistema, B_n operadores do banho térmico e $\xi_\alpha(t)$ processos estocásticos complexos. Usando a Eq. (3.48), a equação de Liouville-von Neumann para o operador densidade total na representação de interação é

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}(t) = -i \left[\tilde{H}_{\text{int}}(t) + \tilde{V}(t), \tilde{\rho}(t) \right], \quad (6.4)$$

cujas soluções são dadas por

$$\rho(t) = \rho_0(t) - i \int_{t_0}^t d\tau \left[\tilde{H}_{\text{int}}(\tau) + \tilde{V}(\tau), \tilde{\rho}(\tau) \right]. \quad (6.5)$$

Usando o formalismo de função de onda estocástica (5), é possível obtermos a dinâmica total (sistema + banho) depois de realizar uma média sobre os processos estocásticos, isto

é, $\rho_{\text{SR}}(t) = \langle \rho(t) \rangle$. Assim, a Eq. (6.4) se torna

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) &= -i \left\langle \left[\tilde{H}_{\text{int}}(t) + \tilde{V}(t), \tilde{\rho}_{\text{SR}} \right] \right\rangle \\ &= -i \left[\tilde{H}_{\text{int}}(t), \tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) \right] - i \left\langle \left[\tilde{V}(t), \tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) \right] \right\rangle. \end{aligned} \quad (6.6)$$

Como estamos somente interessados na dinâmica do sistema isolado, podemos eliminar as variáveis do reservatório usando o traço parcial

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\rho}_S(t) &= -i \text{Tr}_R \left\{ \left[\tilde{H}_{\text{int}}(t), \tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) \right] \right\} - i \text{Tr}_R \left\{ \left\langle \left[\tilde{V}(t), \tilde{\rho}_{\text{SR}}(t) \right] \right\rangle \right\} \\ &\equiv \mathcal{L}_t[\tilde{\rho}_S(t)] + \mathcal{L}_t^{\text{St}}[\tilde{\rho}_S(t)], \end{aligned} \quad (6.7)$$

em que $\mathcal{L}_t[\tilde{\rho}_S(t)]$ e $\mathcal{L}_t^{\text{St}}[\tilde{\rho}_S(t)]$ representam os Lindbladianos do sistema devido ao reservatório térmico e devido ao bombeio estocástico, respectivamente.

Conforme apresentada na Sec. 3.3, a solução do termo $\mathcal{L}_t[\tilde{\rho}_S(t)]$ é escrita como

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_t[\tilde{\rho}_S(t)] &= -i [H_{\text{LS}}, \tilde{\rho}_S(t)] \\ &+ \sum_{\alpha, \beta, \omega} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[A_\beta(\omega) \tilde{\rho}_S(t) A_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega), \tilde{\rho}_S(t) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (6.8)$$

De forma análoga, a Sec. 4.1 apresenta a solução do termo $\mathcal{L}_t^{\text{St}}[\tilde{\rho}_S(t)]$, que pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_t^{\text{St}}[\tilde{\rho}_S(t)] &= -i [H_{\text{EFF}}(t), \tilde{\rho}_S(t)] \\ &+ \sum_{\alpha, \beta, \omega} \eta_{\alpha\beta\omega}(t) \left[V_\beta(\omega) \tilde{\rho}_S(t) V_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ V_\alpha^\dagger(\omega) V_\beta(\omega), \tilde{\rho}_S(t) \right\} \right], \end{aligned} \quad (6.9)$$

Por fim, a dinâmica total considerando o sistema mais o bombeio estocástico pode ser obtida somando as Eqs. (6.8) e (6.9) e escrevendo as equações na representação de Schrödinger

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} \rho_S(t) &= -i [H_S + H_{\text{LS}} + H_{\text{EFF}}, \rho_S(t)] \\ &+ \sum_{\alpha, \beta, \omega} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left[A_\beta(\omega) \tilde{\rho}_S(t) A_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega), \tilde{\rho}_S(t) \right\} \right] \\ &+ \sum_{\alpha, \beta, \omega} \eta_{\alpha\beta\omega}(t) \left[V_\beta(\omega) \tilde{\rho}_S(t) V_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ V_\alpha^\dagger(\omega) V_\beta(\omega), \tilde{\rho}_S(t) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Se o sistema-banho e o bombeio estocástico puderem ser expressos na mesma base, $A_n(\omega) = V_n(\omega)$, podemos então escrever a equação mestra em uma forma mais compacta

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} \rho_S(t) &= -i [H_S + H_{\text{LS}} + H_{\text{EFF}}, \rho_S(t)] \\ &+ \sum_{\alpha, \beta, \omega} \gamma_{\alpha\beta\omega}(t) \left[V_\beta(\omega) \tilde{\rho}_S(t) V_\alpha^\dagger(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ V_\alpha^\dagger(\omega) V_\beta(\omega), \tilde{\rho}_S(t) \right\} \right], \end{aligned} \quad (6.11)$$

em que $\gamma_{\alpha\beta\omega}(t) = \gamma_{\alpha\beta}(\omega) + \eta_{\alpha\beta\omega}(t)$.

6.2 O modelo de atenuação de amplitude

Nesta seção é apresentado um resumo dos exemplos de atenuação de amplitude quântico, conforme a Sec. 3.4.1, e estocástico, conforme a Sec. 4.3.1. Apesar de ambos exemplos já terem sido detalhados anteriormente, para uma abordagem mais didática e evitar que o leitor fique voltando nos capítulos anteriores, algumas equações e passos matemáticos serão apresentados novamente para um melhor entendimento do tema.

6.2.1 Atenuação de amplitude - modelo quântico

Nesta seção iremos mostrar como a dinâmica do sistema é afetada pela interação do mesmo com um banho bosônico térmico. (2,3) Para tal tarefa, usaremos todo o aparato da construção da equação mestra apresentada no Cap. 3. Considere que a evolução é descrita pelo seguinte Hamiltoniano

$$H = \frac{\omega_0}{2} \sigma_z + \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k + \sum_k g_k (\sigma_- b_k^\dagger + \sigma_+ b_k), \quad (6.12)$$

onde ω_0 é a frequência do sistema, g_k é a constante de acoplamento, $\sigma_z, \sigma_\pm = (\sigma_x \pm i \sigma_y)/2$ são operadores de spin e b_k, b_k^\dagger são respectivamente os operadores de criação e destruição atuando no banho. Vamos nos concentrar agora no terceiro termo do lado direito da Eq. (6.12), responsável pela interação entre o sistema e o banho

$$H_{\text{int}} = \sigma_- \otimes \sum_k g_k b_k^\dagger + \sigma_+ \otimes \sum_k g_k b_k \equiv A_1 \otimes B_1 + A_2 \otimes B_2. \quad (6.13)$$

Entretanto os operadores A_j e B_j , com $j = 1, 2$, não são Hermitianos. Para contornar tal problema, podemos escrever o operador H_{int} na seguinte decomposição^a

$$\begin{aligned} H_{\text{int}} &= (\sigma_+ + \sigma_-) \otimes \sum_k g_k \frac{(b_k^\dagger + b_k)}{2} + i(\sigma_+ - \sigma_-) \otimes \sum_k g_k \frac{i(b_k^\dagger - b_k)}{2} \\ &\equiv A_1 \otimes B_1 + A_2 \otimes B_2, \end{aligned} \quad (6.15)$$

Indo desta forma para o referencial de interação

$$\tilde{H}_{\text{int}}(t) = U^\dagger(t) H_{\text{int}}(t) U(t) = \tilde{A}_1(t) \otimes \tilde{B}_1(t) + \tilde{A}_2(t) \otimes \tilde{B}_2(t), \quad (6.16)$$

$$U(t) = e^{-iH_0 t} \quad (6.17)$$

$$H_0 = \frac{\omega_0}{2} \sigma_z + \sum_k g_k b_k^\dagger b_k, \quad (6.18)$$

^aQualquer operador X_k pode ser decomposto da seguinte forma (3)

$$X_k = X_k^{(a)} + X_k^{(b)} \iff X_k^{(a)} = \frac{X_k^\dagger + X_k}{2}, \quad X_k^{(b)} = \frac{i(X_k^\dagger - X_k)}{2}, \quad (6.14)$$

onde no caso acima usamos as relações: $X_k \rightarrow \sigma_-$ e $X_k^\dagger \rightarrow \sigma_+$.

onde os operadores $A_j(t)$ e $B_j(t)$ somente atuam no subespaço do sistema e do banho, respectivamente. Escrevendo explicitamente os operadores na representação de interação, temos

$$\tilde{\sigma}_+(t) = e^{i\omega_0 t} \sigma_+, \quad (6.19)$$

$$\tilde{\sigma}_-(t) = e^{-i\omega_0 t} \sigma_-, \quad (6.20)$$

$$\tilde{b}_k^\dagger(t) = e^{i\omega_k t} b_k^\dagger, \quad (6.21)$$

$$\tilde{b}_k(t) = e^{-i\omega_k t} b_k. \quad (6.22)$$

Assim, os operadores $\tilde{A}_j(t)$ e $\tilde{B}_j(t)$ são

$$\begin{aligned} \tilde{A}_1(t) &= \tilde{\sigma}_+(t) + \tilde{\sigma}_-(t) = e^{i\omega_0 t} \sigma_+ + e^{-i\omega_0 t} \sigma_-, \\ \tilde{B}_1(t) &= \frac{1}{2} \sum_k g_k [\tilde{b}_k^\dagger(t) + \tilde{b}_k(t)] = \frac{1}{2} \sum_k g_k (e^{i\omega_k t} b_k^\dagger + e^{-i\omega_k t} b_k), \\ \tilde{A}_2(t) &= i[\tilde{\sigma}_+(t) - \tilde{\sigma}_-(t)] = i(e^{i\omega_0 t} \sigma_+ - e^{-i\omega_0 t} \sigma_-), \\ \tilde{B}_2(t) &= \frac{i}{2} \sum_k g_k [\tilde{b}_k^\dagger(t) - \tilde{b}_k(t)] = \frac{i}{2} \sum_k g_k (e^{i\omega_k t} b_k^\dagger - e^{-i\omega_k t} b_k). \end{aligned} \quad (6.23)$$

Assumindo que o banho possui um estado térmico ρ_B , isto é,

$$\rho_B = \frac{e^{-\beta H_S}}{Z}, \quad Z = \text{Tr} [e^{-\beta H_S}], \quad \beta = \frac{1}{T}, \quad (6.24)$$

onde T é a temperatura em que o banho se encontra. Desta maneira, tem-se as seguintes relações para os operadores de criação e destruição do banho térmico (2)

$$\langle b_k b_{k'} \rangle = \langle b_k^\dagger b_{k'}^\dagger \rangle = 0, \quad (6.25)$$

$$\langle b_k^\dagger b_{k'} \rangle = \delta_{k k'} N(\omega_k),$$

$$\langle b_k b_{k'}^\dagger \rangle = \delta_{k k'} [1 + N(\omega_k)], \quad (6.26)$$

$$N(\omega_k) = \frac{1}{e^{\beta\omega_k} - 1}. \quad (6.27)$$

Estamos aptos neste momento a calcular os coeficientes da equação mestra. Utilizando a Eq. (3.125), temos

$$\gamma_{\alpha\beta}(\omega_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{i\omega_0 u} \text{Tr}_R [\tilde{B}_\alpha(t) B_\beta(0) \rho_R] = \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{i\omega_0 u} \langle \tilde{B}_\alpha(t) B_\beta(0) \rangle. \quad (6.28)$$

Usando a Eq. (6.15) e Eq. (6.23), podemos calcular as correlações do sistema para os pares $\alpha = 1, \beta = 1$; $\alpha = 1, \beta = 2$; $\alpha = 2, \beta = 1$ e $\alpha = 2, \beta = 2$

$$\langle \tilde{B}_1(t) B_1(0) \rangle = \frac{1}{4} \sum_k |g_k|^2 \left\{ e^{i\omega_k u} N(\omega_k) + e^{-i\omega_k u} [1 + N(\omega_k)] \right\}, \quad (6.29)$$

$$\langle \tilde{B}_1(t) B_2(0) \rangle = \frac{i}{4} \sum_k |g_k|^2 \left\{ -e^{i\omega_k u} N(\omega_k) + e^{-i\omega_k u} [1 + N(\omega_k)] \right\}, \quad (6.30)$$

$$\langle \tilde{B}_2(t) B_1(0) \rangle = \frac{i}{4} \sum_k |g_k|^2 \left\{ e^{i\omega_k u} N(\omega_k) - e^{-i\omega_k u} [1 + N(\omega_k)] \right\}, \quad (6.31)$$

$$\langle \tilde{B}_2(t) B_2(0) \rangle = \frac{1}{4} \sum_k |g_k|^2 \left\{ e^{i\omega_k u} N(\omega_k) + e^{-i\omega_k u} [1 + N(\omega_k)] \right\}. \quad (6.32)$$

Nosso próximo passo é transformar as correlações no espectro contínuo de frequências do banho, usando a relação (73)

$$\sum_k f(\omega_k) \rightarrow \int_0^{+\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{|g(\omega)|^2} f(\omega), \quad (6.33)$$

em que $f(\omega_k)$ é uma função qualquer das frequências do banho e $J(\omega)$ é a densidade espectral também do banho. Usando esta propriedade, as correlações se tornam

$$\langle \tilde{B}_1(t) B_1(0) \rangle = \frac{1}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left\{ e^{i\omega u} N(\omega) + e^{-i\omega u} [1 + N(\omega)] \right\}, \quad (6.34)$$

$$\langle \tilde{B}_1(t) B_2(0) \rangle = \frac{i}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left\{ -e^{i\omega u} N(\omega) + e^{-i\omega u} [1 + N(\omega)] \right\}, \quad (6.35)$$

$$\langle \tilde{B}_2(t) B_1(0) \rangle = \frac{i}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left\{ e^{i\omega u} N(\omega) - e^{-i\omega u} [1 + N(\omega)] \right\}, \quad (6.36)$$

$$\langle \tilde{B}_2(t) B_2(0) \rangle = \frac{1}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left\{ e^{i\omega u} N(\omega) + e^{-i\omega u} [1 + N(\omega)] \right\}. \quad (6.37)$$

Usando a representação da função delta (74)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} du e^{i(\omega - \omega_0)u} = 2\pi \delta(\omega - \omega_0), \quad (6.38)$$

podemos finalmente calcular os coeficientes da equação mestra em questão

$$\begin{aligned} \gamma_{11}(\omega_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{i\omega_0 u} \langle \tilde{B}_1(u) B_1(0) \rangle \\ &= \frac{1}{4} \int_0^{+\infty} d\omega J(\omega) \left\{ 2\pi \delta(\omega + \omega_0) N(\omega) + 2\pi \delta(\omega + \omega_0) [1 + N(\omega)] \right\}. \end{aligned} \quad (6.39)$$

Como ω_0 é positivo, a contribuição referente ao termo $\delta(\omega + \omega_0)$ é nula, resultando em um termo somente proporcional a $\delta(\omega - \omega_0)$. Já para o caso contrário, em que $\omega_0 < 0$, somente o termo proporcional a $\delta(\omega + \omega_0)$ sobrevive

$$\begin{aligned} \gamma_{11}(\omega_0) &= \frac{\pi}{2} J(\omega_0) [1 + N(\omega_0)], & \gamma_{11}(-\omega_0) &= \frac{\pi}{2} J(\omega_0) N(\omega_0), \\ \gamma_{12}(\omega_0) &= -\frac{i\pi}{2} J(\omega_0) [1 + N(\omega_0)], & \gamma_{12}(-\omega_0) &= -\frac{i\pi}{2} J(\omega_0) N(\omega_0), \\ \gamma_{21}(\omega_0) &= \frac{i\pi}{2} J(\omega_0) [1 + N(\omega_0)], & \gamma_{21}(-\omega_0) &= \frac{i\pi}{2} J(\omega_0) N(\omega_0), \\ \gamma_{22}(\omega_0) &= \frac{\pi}{2} J(\omega_0) [1 + N(\omega_0)], & \gamma_{22}(-\omega_0) &= \frac{\pi}{2} J(\omega_0) N(\omega_0). \end{aligned} \quad (6.40)$$

Adicionalmente, pode-se escrever as matrizes dos coeficientes da equação mestra

$$\gamma(\omega_0) = \frac{\pi}{2} J(\omega_0) [1 + N(\omega_0)] \begin{bmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{bmatrix}, \quad (6.41)$$

$$\gamma(-\omega_0) = \frac{\pi}{2} J(\omega_0) N(\omega_0) \begin{bmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{bmatrix}. \quad (6.42)$$

Através do conjunto das Eqs. (6.23), os operadores $A_j(\omega_0)$ e $B_j(\omega_0)$, com $j = 1, 2$, são facilmente identificados como

$$\begin{aligned} A_1(\omega_0) &= \sigma_-, \\ A_1(-\omega_0) &= \sigma_+, \\ A_2(\omega_0) &= -i\sigma_-, \\ A_2(-\omega_0) &= i\sigma_+, \end{aligned} \quad (6.43)$$

que serão usados para a construção da equação mestra do sistema. Usando as Eqs. (6.43), a equação mestra se torna

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_S(t) &= -i \left[\left(\frac{\omega_0 + \Delta}{2} + \Delta' \right) \sigma_z, \rho_S(t) \right] \\ &+ 2\pi J(\omega_0) [1 + N(\omega_0)] \left[\sigma_- \rho_S(t) \sigma_+ - \frac{1}{2} \{ \sigma_+ \sigma_-, \rho_S(t) \} \right] \\ &+ 2\pi J(\omega_0) N(\omega_0) \left[\sigma_+ \rho_S(t) \sigma_- - \frac{1}{2} \{ \sigma_- \sigma_+, \rho_S(t) \} \right], \end{aligned} \quad (6.44)$$

onde usamos o fato que ao efetuar o termo da soma $\sum_{\alpha, \beta, \omega} \gamma_{\alpha\beta}(\omega)$, com $\alpha \neq \beta$, os coeficientes da equação mestra se cancelam, conforme pode ser visto nas Eq. (6.40) e conforme mencionado na Sec. 3.3, representam a decoerência induzida no sistema devido a interação do mesmo com o banho térmico. Os termos Δ e Δ' representam os *Lamb-Shifts* independente e dependente da temperatura, respectivamente. Conforme a Eq. (3.200), tais termos são escritos como

$$\Delta = \text{P.V.} \int_0^{+\infty} d\omega \frac{J(\omega)}{\omega_0 - \omega} \frac{(\sigma_z + \mathbf{1})}{2}, \quad (6.45)$$

$$\Delta' = \text{P.V.} \int_0^{+\infty} d\omega \frac{J(\omega)N(\omega)}{\omega_0 - \omega} \sigma_z, \quad (6.46)$$

Sendo P.V. o valor principal de Cauchy.

6.2.2 Atenuação de amplitude - ruído estocástico clássico

Nesta seção iremos mostrar como a dinâmica do sistema é afetada pela injeção de um ruído estocástico clássico. (44, 86) Supondo que o ruído possui uma frequência ω , o Hamiltoniano que descreve a dinâmica é dado por

$$H(t) = \frac{\omega_0}{2} \sigma_z + i \left[e^{-i\omega t} u(t) \sigma_+ - e^{i\omega t} u^*(t) \sigma_- \right], \quad (6.47)$$

onde ω_0 é a frequência natural do sistema, $\sigma_{\pm} = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$ são os operadores de spin e também atuam no sistema e $u(t)$, $u^*(t)$ são ruídos estocásticos Gaussianos com valor médio zero. O processo que será feito é similar ao que foi apresentado na seção 6.2, então o termo de interação é

$$V(t) = i e^{-i\omega t} u(t) \sigma_+ - i e^{i\omega t} u^*(t) \sigma_- \equiv \xi_1(t) V_1 + \xi_2(t) V_2, \quad (6.48)$$

em que a $\xi_j(t)$, com $j = 1, 2$, representa uma variável estocástica e segue as seguintes propriedades

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad (6.49)$$

$$\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = \langle \xi^*(t) \xi^*(t') \rangle = 0, \quad (6.50)$$

$$\langle \xi^*(t) \xi(t') \rangle = \langle \xi(t) \xi^*(t') \rangle = \chi(t, t'), \quad (6.51)$$

$$\xi(t) = e^{-i\omega t} u(t), \quad (6.52)$$

$$\xi^*(t) = e^{i\omega t} u^*(t), \quad (6.53)$$

onde $\langle \dots \rangle$ representa a média sobre as realizações estocásticas. (43) Movendo $V(t)$ para a representação de interação,

$$\tilde{V}(t) = \xi_1(t) e^{i\omega t} \sigma_+ - \xi_2(t) e^{-i\omega t} \sigma_- \equiv \xi_1(t) \tilde{V}_1(t) + \xi_2(t) \tilde{V}_2(t), \quad (6.54)$$

em que claramente notam-se as seguintes relações

$$V_1(\omega_0) = 0, \quad (6.55)$$

$$V_1(-\omega_0) = \sigma_+, \quad (6.56)$$

$$V_2(\omega_0) = \sigma_-, \quad (6.57)$$

$$V_2(-\omega_0) = 0. \quad (6.58)$$

Desta maneira, os únicos termos não nulos na correlação estocástica são: $(\alpha, \beta, \omega) = (1, 1, -\omega_0)$ e $(\alpha, \beta, \omega) = (2, 2, \omega_0)$, gerando as seguintes correlações

$$\begin{aligned} \chi_{11}(t, t') &= \langle \xi_1^*(t) \xi_1(t') \rangle = e^{i\omega(t-t')} \langle u^*(t) u(t') \rangle, \\ \chi_{22}(t, t') &= \langle \xi_2^*(t) \xi_2(t') \rangle = e^{-i\omega(t-t')} \langle u(t) u^*(t') \rangle. \end{aligned} \quad (6.59)$$

Assumindo que as correlações são homogêneas no tempo, isto é, elas somente dependem da diferença de tempos $\tau = t - t'$ (3), temos

$$\langle u^*(t) u(t') \rangle = \langle u(t) u^*(t') \rangle = S(\tau) \implies \chi(\tau) = e^{i\omega\tau} S(\tau), \quad \text{com } \tau = t - t'. \quad (6.60)$$

Usando a Eq. (4.54), vamos calcular os coeficientes da equação mestra (taxas de decaimentos do sistema) estocástica para o conjunto de índices α, β, ω apresentados acima

$$\begin{aligned} \eta_{\alpha\beta\omega}(t) &\equiv \int_0^t d\tau \left[\chi_{\alpha\beta}(t, t-\tau) e^{-i\omega\tau} + \chi_{\alpha\beta}(t-\tau, t) e^{i\omega\tau} \right], \\ \eta_{1,1,-\omega_0}(t) &= \int_0^t d\tau \left[\chi_{11}(\tau) e^{-i(\omega-\omega_0)\tau} + \chi_{11}(-\tau) e^{i(\omega-\omega_0)\tau} \right], \end{aligned} \quad (6.61)$$

$$\begin{aligned} &= 2 \int_0^t d\tau S(\tau) \cos(\Delta\omega\tau) \equiv \eta(t), \\ \eta_{2,2,\omega_0}(t) &= 2 \int_0^t d\tau S(\tau) \cos(\Delta\omega\tau) \equiv \eta(t), \end{aligned} \quad (6.62)$$

em que $\Delta\omega = \omega - \omega_0$.

Sendo assim, já estamos aptos a escrever a equação mestra estocástica do sistema (veja)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_S(t) = & -i \left[(\omega_0 - \Pi(t)) \frac{\sigma_z}{2}, \rho_S(t) \right] + \eta(t) \left[\sigma_+ \rho_S(t) \sigma_- - \frac{1}{2} \{ \sigma_- \sigma_+, \rho_S(t) \} \right] \\ & + \eta(t) \left[\sigma_- \rho_S(t) \sigma_+ - \frac{1}{2} \{ \sigma_+ \sigma_-, \rho_S(t) \} \right] \end{aligned} \quad (6.63)$$

em que os coeficientes $\eta(t)$, Eqs. (6.61) e (6.62), representam as taxas de decaimento da equação mestra devido ao bombeio estocástico, isto é, a perda de informação do sistema devido a interação com o ruído estocástico. O termo $\Pi(t)\sigma_z/2$ representa o deslocamento de energia devido ao termo $H_{\text{EFF}}(t)$. Segundo a Eq. (4.93), ele é escrito como

$$\Pi(t) = \int_0^t d\tau S(\tau) \sin(\Delta\omega\tau). \quad (6.64)$$

6.2.3 Evolução conjunta

Nesta seção será mostrada qual forma a equação mestra assume quando considera-se a dinâmica conjunta, isto é, a evolução referente ao banho térmico e a evolução referente ao ruído estocástico clássico. Combinando as Eq. (6.44) e Eq. (6.63), temos a forma da seguinte equação de Lindblad

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_S(t) = & -i \left[\left(\omega_0 + \frac{\Delta}{2} + \Delta' - \frac{\Pi(t)}{2} \right) \sigma_z, \rho_S(t) \right] \\ & + \gamma_1(t) \left[\sigma_+ \rho_S(t) \sigma_- - \frac{1}{2} \{ \sigma_- \sigma_+, \rho_S(t) \} \right] \\ & + \gamma_2(t) \left[\sigma_- \rho_S(t) \sigma_+ - \frac{1}{2} \{ \sigma_+ \sigma_-, \rho_S(t) \} \right], \end{aligned} \quad (6.65)$$

onde os coeficientes da equação mestra são

$$\gamma_1(t) = \gamma N(\omega_0) + \eta(t), \quad (6.66)$$

$$\gamma_2(t) = \gamma [1 + N(\omega_0)] + \eta(t), \quad (6.67)$$

sendo os termos proporcionais a $N(\omega_0)$ e $\eta(t)$, relacionados ao banho térmico e o bombeio estocástico, respectivamente. Por fim, o termo $\gamma = 2\pi J(\omega_0)$ é relacionado com a densidade espectral. Observe que a Eq. (6.65) já está na forma canônica, sendo permitido aplicar-se a medida de não Markovianidade ACHL diretamente aos coeficientes. Usando as Eq. (5.48) e Eq. (5.49), temos que o sistema passa a ser não Markoviano RHP^b quando um dos coeficientes da equação mestra se torna negativo. Como $\gamma_2(t)$ é sempre positivo para o nosso modelo, devido ao termo $N(\omega_0) + 1$, vamos analisar apenas o termo $\gamma_1(t)$. Vale ressaltar que como $\gamma_2(t)$ é sempre positivo, nossa dinâmica nunca será não Markoviana BLP, pois para tal condição teríamos que ter $\gamma_1(t) + \gamma_2(t) < 0$ (veja Sec. 5.2).

^bReferente ao uso da definição de Markovianidade RHP, presente na definição 7.

Usando a representação matricial dos operadores σ_{\pm} e considerando o operador densidade $\rho_S(t)$ como

$$\rho_S(t) = \begin{bmatrix} \rho_{11}(t) & \rho_{12}(t) \\ \rho_{21}(t) & \rho_{22}(t) \end{bmatrix}, \quad (6.68)$$

a Eq. (6.65) assumem a forma

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \rho_{11}(t) & \rho_{12}(t) \\ \rho_{21}(t) & \rho_{22}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_1(t)\rho_{22}(t) - \gamma_2(t)\rho_{11}(t) & -\left(2ia(t) + \frac{\gamma_1(t)}{2} + \frac{\gamma_2(t)}{2}\right)\rho_{12}(t) \\ \left(2ia(t) - \frac{\gamma_1(t)}{2} - \frac{\gamma_2(t)}{2}\right)\rho_{21}(t) & -\gamma_1(t)\rho_{22}(t) + \gamma_2(t)\rho_{11}(t) \end{bmatrix}, \quad (6.69)$$

em que o parâmetro $a(t)$ é

$$a(t) = \omega_0 + \frac{\Delta}{2} + \Delta' - \frac{\Pi(t)}{2}. \quad (6.70)$$

Devido ao operador densidade satisfazer as propriedades $\rho_{11}(t) + \rho_{22}(t) = 1$ e $\rho_{12}(t) = \rho_{21}^*(t)$, a Eq. (6.69) se torna

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \rho_{11}(t) & \rho_{12}(t) \\ \rho_{21}(t) & \rho_{22}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_1(t) - [\gamma_1(t) + \gamma_2(t)]\rho_{11}(t) & -\left(2ia(t) + \frac{\gamma_1(t)}{2} + \frac{\gamma_2(t)}{2}\right)\rho_{12}(t) \\ \left(2ia(t) - \frac{\gamma_1(t)}{2} - \frac{\gamma_2(t)}{2}\right)\rho_{21}(t) & \gamma_2(t) - [\gamma_1(t) + \gamma_2(t)]\rho_{22}(t) \end{bmatrix}. \quad (6.71)$$

Assim, vamos apenas nos focar nos termos $\rho_{11}(t)$ e $\rho_{21}(t)$, sendo eles escritos como

$$\frac{d}{dt}\rho_{11}(t) = -[\gamma_1(t) + \gamma_2(t)]\rho_{11}(t) + \gamma_{11}(t), \quad (6.72)$$

$$\frac{d}{dt}\rho_{21}(t) = \left[2ia(t) - \frac{\gamma_1(t)}{2} - \frac{\gamma_2(t)}{2}\right]\rho_{21}(t). \quad (6.73)$$

O termo $\rho_{21}(t)$ pode ser calculado facilmente, sendo sua solução dada por

$$\rho_{21}(t) = e^{2iA(t)}e^{-\Gamma(t)/2}\rho_{21}(0), \quad (6.74)$$

em que $A(t)$ e $\Gamma(t)$ são definidos conforme abaixo

$$A(t) = \int_0^t a(u)du, \quad (6.75)$$

$$\Gamma(t) = \int_0^t [\gamma_1(u) + \gamma_2(u)]du. \quad (6.76)$$

A equação diferencial referente ao termo de população $\rho_{11}(t)$ é mais complexa e sua solução pode ser obtida com o uso do método do fator integrante (126)

$$\rho_{11}(t) = e^{-\Gamma(t)} \int_0^t e^{\Gamma(u)}\gamma_1(u)du + e^{-\Gamma(t)}\rho_{11}(0). \quad (6.77)$$

Podemos ainda calcular a energia média do sistema, definida como

$$\begin{aligned} \langle E(t) \rangle &= \langle H_S(t) \rangle \\ &= \frac{\omega_0}{2} \text{Tr}[\sigma_z \rho_S(t)] \\ &= \omega_0 \left[\rho_{11}(t) - \frac{1}{2} \right]. \end{aligned} \quad (6.78)$$

Como nosso sistema está em contato com um reservatório térmico, é interessante analisarmos como a temperatura influencia diretamente a Markovianidade do sistema. Para isso, podemos usar a distribuição de Bose-Einstein para calcularmos uma temperatura, sendo ela escrita como

$$N(\omega_0) = \frac{1}{e^{\omega_0/T} - 1}, \quad (6.79)$$

sendo T a temperatura do banho térmico. Usando o valor de $N(\omega_0) = 0.05$, que é um valor típico em experimentos de íons aprisionados (44), temos que a temperatura é

$$T = \frac{\omega_0}{\ln \left[\frac{N(\omega_0)+1}{N(\omega_0)} \right]} \simeq 0.33 \omega_0, \quad (6.80)$$

sendo a temperatura dada em unidades de frequência.

Conforme discutido anteriormente, o sistema passa a ser não Markoviano RHP quando o coeficiente $\gamma_1(t) < 0$. Assim, podemos encontrar um limiar em que ocorre a transição entres os regimes Markoviano e não Markoviano RHP, e relacionar tal fato com a temperatura calculada. Tal limiar pode ser obtido fazendo a seguinte igualdade

$$\gamma N(\omega_0) + \eta(t) = 0. \quad (6.81)$$

Assim, devemos achar a menor influência que o termo relacionado ao bombeio estocástico aplica no sistema, sendo este termo chamado de η_{\min} e definido como

$$\eta_{\min} = \min_{t_0 \leq \tau \leq t} \eta(\tau). \quad (6.82)$$

Para isso, temos que escolher os parâmetros da função $\eta(t)$ de modo a obtermos seu mínimo. Consequentemente, podemos obter a temperatura T que representa a temperatura máxima sob a qual a dinâmica do sistema mostra os efeitos de não Markovianidade RHP, sendo que para temperaturas maiores o sistema passa a ser Markoviano. Este processo ficará mais claro nas próximas seções em que aplicamos três ruídos estocásticos no sistema. Na Fig. 1(a) temos um exemplo da representação gráfica do termo η_{\min} , em que foi utilizado um ruído exponencial, Eq. (6.83). Podemos observar na Fig. 1(b) o comportamento de $\gamma_1(t)$ em função do tempo para as temperaturas de $T = 0.10 \omega_0$, $T = 0.33 \omega_0$ e $T = 0.50 \omega_0$. Ainda, temos que somente para a temperatura de $T = 0.10 \omega_0$ ocorreu o regime não Markoviano RHP, pois apenas neste caso o coeficiente $\gamma_1(t)$ assumiu valores negativos.

6.3 Ruído exponencial (OU)

Nesta seção vamos analisar como a dinâmica do sistema se comporta com a injeção de um ruído exponencial. O desenvolvimento desta tarefa será inserir a correlação $S(\tau)$ na Eq. (6.65) e utilizar a medida de não Markovianidade RHP. Usando um ruído exponencial ou um processo de Ornstein-Uhlenbeck (OU) (127),

$$S_{\text{OU}} = \frac{\Omega}{2\tau_c} e^{-\tau/\tau_c}, \quad (6.83)$$

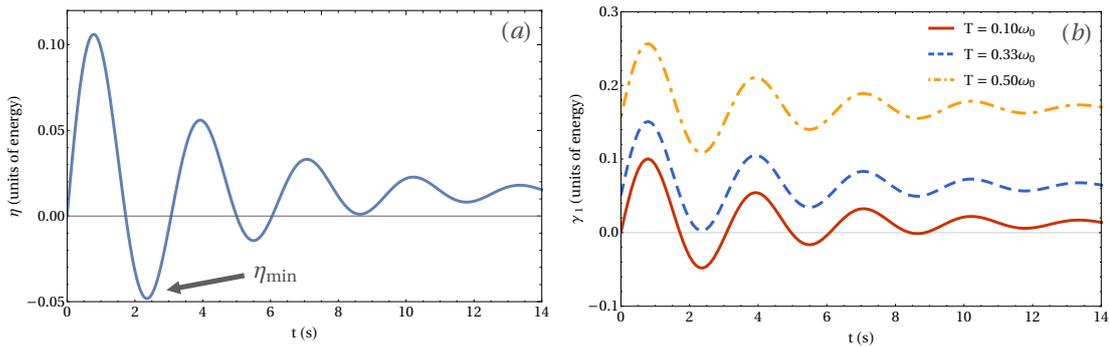


Figura 1 – (a) $\eta(t)$ mostrando o valor η_{\min} e (b) $\gamma_1(t)$ como função do tempo usando o bombeio exponencial para três temperaturas: $T = 0.10\omega_0$ (linha sólida vermelha), $T = 0.33\omega_0$ (linha tracejada azul) que mostra o limiar da Markovianidade RHP e $T = 0.50\omega_0$ (linha traço-ponto amarela). Os outros parâmetros usados nas curvas foram: $\Delta\omega = 2$, $\tau_c = 4.25$, $\Omega = 0.91$ e $\gamma = 1$.
Fonte: Adaptada de COSTA-FILHO; LIMA; PAIVA; SOARES, MORGADO; FRANCO; SOARES-PINTO. (16)

onde Ω é a amplitude do ruído e τ_c é o tempo de correlação. Conforme descrito na seção 3.3, toda dedução da equação mestra foi construída sob o alicerce de acoplamento fraco entre o sistema e o banho. Sendo assim, temos que Ω deve permanecer pequeno para não violar tal condição. Usando a Eq. (4.54), o coeficiente da equação mestra se torna

$$\begin{aligned} \eta(t) &= 2 \int_0^t d\tau S(\tau) \cos(\Delta\omega \tau) \\ &= \frac{\Omega}{1 + (\Delta\omega \tau_c)^2} \left[1 + \sqrt{1 + (\Delta\omega \tau_c)^2} e^{-t/\tau_c} \sin(\Delta\omega - \phi) \right], \end{aligned} \quad (6.84)$$

em que

$$\phi = \sin^{-1} \left[\frac{1}{\sqrt{1 + (\Delta\omega \tau_c)^2}} \right]. \quad (6.85)$$

Analisando a função $\eta(t)$, temos que ela possui um mínimo, η_{\min} , quando $\Delta\omega \tau_c = 8.5$, então escolhemos $\Delta\omega = 2$ e $\tau_c = 4.25$. Assim, foi calculado o valor de Ω em que o sistema atinge o limiar de Markovianidade, ou seja, a menor intensidade do bombeio em que o sistema alcança o limite de Markovianidade RHP. Nesta condição, o coeficiente da equação mestra $\gamma_1(t)$ toca o eixo horizontal, conforme pode ser observado nas figuras abaixo, e a amplitude do bombeio assume o valor de $\Omega = 0.91$. Desta maneira, temos que para a temperatura $T = 0.33\omega_0$, Eq. (6.80), ocorre o limiar da transição do regime Markovianidade RHP. Somente para valores abaixo desta temperatura o sistema apresentará a não Markovianidade RHP. Os coeficientes $\eta(t)$ e $\gamma_1(t)$ são mostrados na Fig. 1

Reescrevendo a Eq. (6.78), temos

$$\langle E(t) \rangle = \omega_0 \left[\rho_{11}(t) - \frac{1}{2} \right]. \quad (6.86)$$

Podemos observar que é possível calcularmos a energia média do sistema considerando o bombeio estocástico, E_P , e sem, E_{NP} . Ainda, o cálculo pode ser realizado em dois

regimes diferentes, o primeiro para a temperatura de Markovianidade $T = 0.33\omega_0$ (regime Markoviano RHP) e o segundo para o valor de $T = 0.10\omega_0$ (regime não Markoviano RHP). O estado inicial utilizado foi

$$\rho(0) = |+\rangle \langle +|, \quad (6.87)$$

na qual

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle). \quad (6.88)$$

Os gráficos das energias podem ser vistos na Fig. 2, em que podemos notar que as energias médias em ambos os regimes são equivalentes, mostrando que quando o sistema muda do regime Markoviano RHP para não Markoviano, a variação da energia média do sistema é pequena.

Como observado na Fig. 1(b), para a temperatura $T = 0.10\omega_0$ há algumas regiões em que o coeficiente da equação mestra, $\gamma_1(t)$, se torna negativo. Isto nos possibilita utilizar a medida de não Markovianidade ACHL, presente na Eq. (5.48). Os valores encontrados para as temperaturas $T = 0.10\omega_0$ e $T = 0.30\omega_0$, foram respectivamente $\mathcal{N}_{\text{ACHL}}^I = 0.0546$ e $\mathcal{N}_{\text{ACHL}}^I = 0.0046$. Foi usado um valor de temperatura próxima a temperatura de Markovianidade para mostrar a diferença no valor da medida. O gráfico para a função $f(t)$ da medida ACHL, Eq. (5.47), pode ser visto na Fig. 3.

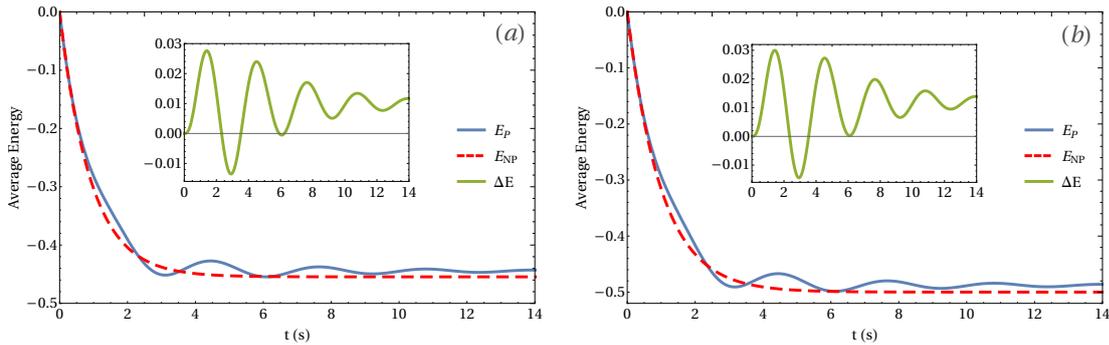


Figura 2 – Energia média do sistema, em unidades de ω_0 , com (E_P , linha sólida azul) e sem o bombeio exponencial (E_{NP} , linha tracejada vermelha). Inset: diferença das energias médias, $\Delta E = E_P - E_{NP}$. (a) Regime Markoviano RHP, com temperatura $T = 0.33\omega_0$ e (b) Regime não Markoviano RHP, com temperatura $T = 0.10\omega_0$. Os outros parâmetros usados nas curvas foram: $\Delta\omega = 2$, $\tau_c = 4.25$, $\Omega = 0.91$, $\gamma = 1$. Devido a equivalência das energias média em ambos os regimes, o custo energético para induzir não Markovianidade no sistema é baixo.

Fonte: Adaptada de COSTA-FILHO; LIMA; PAIVA; SOARES, MORGADO; FRANCO; SOARES-PINTO. (16)

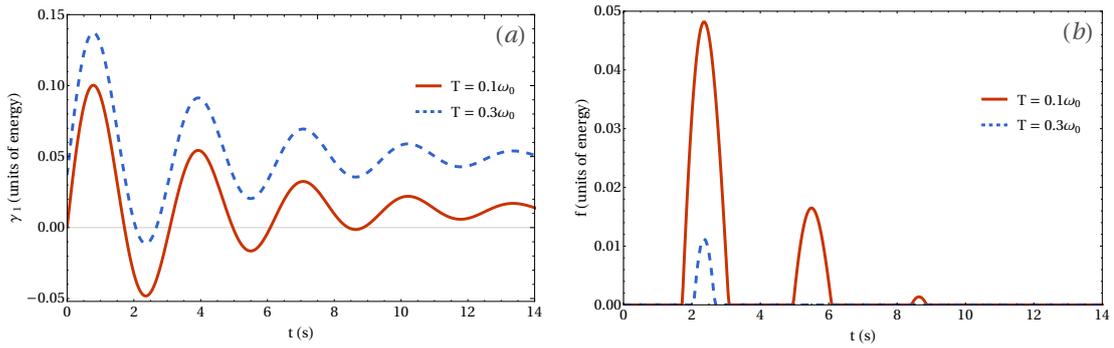


Figura 3 – (a) $\gamma_1(t)$ em função do tempo sobre a influência de um bombeio exponencial para o regime de não Markovianidade RHP, com temperaturas $T = 0.10\omega_0$ (linha sólida vermelha) e $T = 0.30\omega_0$ (linha tracejada azul). (b) $f(t)$ da medida ACHL em função do tempo, no mesmo regime, com as temperaturas $T = 0.10\omega_0$ (linha sólida vermelha) e $T = 0.30\omega_0$ (linha tracejada azul). Os valores da medida ACHL são $\mathcal{N}_{\text{ACHL}}^I = 0.0546$ e $\mathcal{N}_{\text{ACHL}}^I = 0.0046$. Os outros parâmetros usados nas curvas foram: $\Delta\omega = 2$, $\tau_c = 4.25$, $\Omega = 0.91$ e $\gamma = 1$.

Fonte: Adaptada de COSTA-FILHO; LIMA; PAIVA; SOARES, MORGADO; FRANCO; SOARES-PINTO. (16)

6.4 Ruído Gaussiano (SE)

Nesta seção vamos fazer o processo análogo ao apresentado na seção 6.3, porém foi utilizado um bombeio Gaussiano ou *Square Exponencial* (SE) (127), definido como

$$S_{\text{SE}}(\tau) = \frac{\Omega}{\sqrt{\pi} \tau_c} e^{(-\tau/\tau_c)^2}. \quad (6.89)$$

De forma similar ao que foi realizado para o ruído exponencial, a função $\eta(t)$ possui um mínimo quando $\Delta\omega \tau_c = 8.5$. Escolhendo os valores de $\Delta\omega = 2$ e $\tau_c = 4.25$, obtemos um valor para a amplitude do ruído Gaussiano de $\Omega = 0.47$, para o limite de Markovianidade RHP. Na Fig. 4, pode-se observar as energias médias do sistema nos regimes de Markovianidade RHP e não Markovianidade RHP, onde as respectivas temperaturas destes regimes são $T = 0.10\omega_0$ e $T = 0.33\omega_0$. Novamente podemos observar a semelhança entre as energias média do sistema entre os dois regimes, fazendo com que a não Markovianidade induzida no sistema não altere de forma significante a energia média do sistema. O cálculo analítico do coeficiente $\eta(t)$ não será apresentado, pois somente para o caso do ruído exponencial (OU) ele possui uma forma analítica.

Novamente foram calculados os valores da medida ACHL, Eq.(5.48), obtendo os valores de $\mathcal{N}_{\text{ACHL}}^I = 0.0585$ para a temperatura $T = 0.10\omega_0$ e $\mathcal{N}_{\text{ACHL}}^I = 0.0040$ para a temperatura $T = 0.30\omega_0$. O gráfico para a função $f(t)$ da medida ACHL, Eq. (5.47), pode ser vista na Fig. 5.

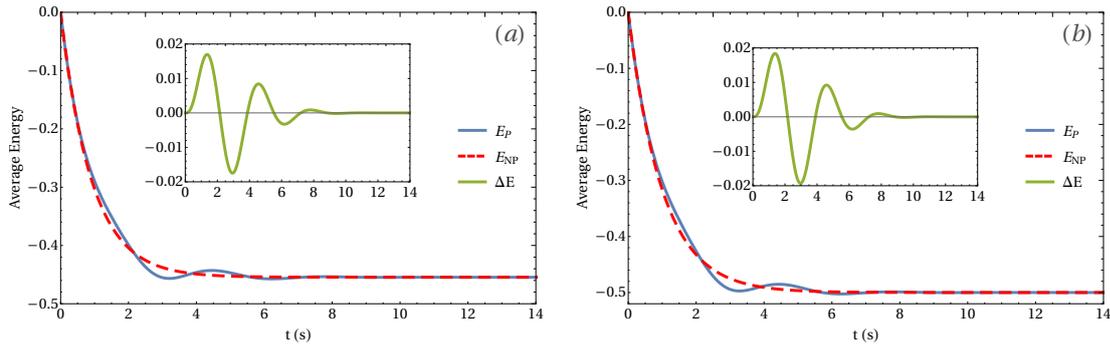


Figura 4 – Energia média do sistema, em unidades de ω_0 , com (E_P , linha sólida azul) e sem o bombeio Gaussiano (E_{NP} , linha tracejada vermelha). Inset: diferença das energias médias, $\Delta E = E_P - E_{NP}$. (a) Regime Markoviano RHP, com temperatura $T = 0.33\omega_0$ e (b) Regime não Markoviano RHP, com temperatura $T = 0.10\omega_0$. Os outros parâmetros usados nas curvas foram: $\Delta\omega = 2$, $\tau_c = 4.25$, $\Omega = 0.91$ e $\gamma = 1$. Devido a equivalência das energias média em ambos os regimes, sua variação para induzir não Markovianidade no sistema é pequena.

Fonte: Adaptada de COSTA-FILHO; LIMA; PAIVA; SOARES, MORGADO; FRANCO; SOARES-PINTO. (16)

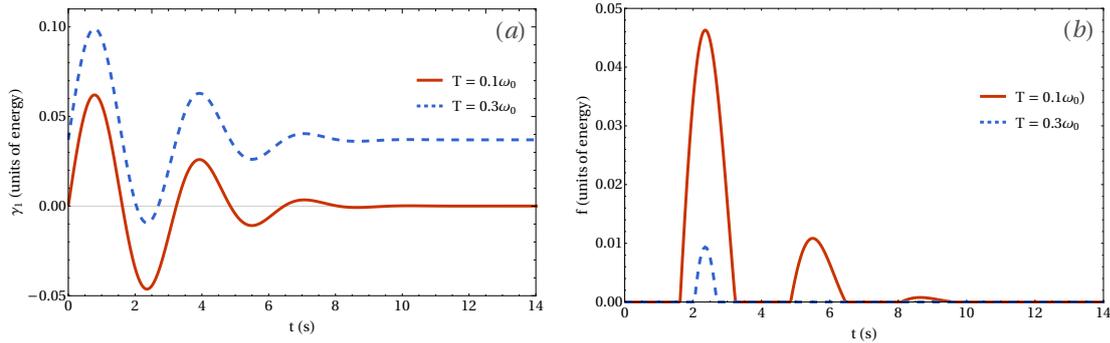


Figura 5 – (a) $\gamma_1(t)$ em função do tempo sobre a influência de um bombeio Gaussiano para o regime de não Markovianidade RHP, com temperaturas $T = 0.10\omega_0$ (linha sólida vermelha) e $T = 0.30\omega_0$ (linha tracejada azul). (b) $f(t)$ da medida ACHL em função do tempo, no mesmo regime, com as temperaturas $T = 0.10\omega_0$ (linha sólida vermelha) e $T = 0.30\omega_0$ (linha tracejada azul). Os valores da medida ACHL são $\mathcal{N}_{ACHL}^I = 0.0585$ e $\mathcal{N}_{ACHL}^I = 0.0040$. Os outros parâmetros usados nas curvas foram: $\Delta\omega = 2$, $\tau_c = 4.25$, $\Omega = 0.91$ e $\gamma = 1$.

Fonte: Adaptada de COSTA-FILHO; LIMA; PAIVA; SOARES, MORGADO; FRANCO; SOARES-PINTO. (16)

6.5 Ruído lei de potência (PL)

Nesta seção apresentaremos os resultados obtidos utilizando uma correlação de lei de potência ou *Power Law* (PL) (127)

$$S_{PL}(\tau) = \frac{(\alpha - 1) \Omega}{2} \frac{1}{\tau_c (\tau/\tau_c + 1)^\alpha}, \quad (6.90)$$

onde temos que $\alpha > 2$. No caso, utilizamos $\alpha = 3$ e novamente usando η_{\min} , obtivemos o produto $\Delta\omega\tau_c = 20$, sendo que foi escolhido os valores de $\Delta\omega = 2$ e $\tau_c = 10$. Desta maneira, o limite de Markovianidade RHP é atingido quando a amplitude do ruído assume o valor de $\Omega = 1.35$. Na Fig. 4, podem ser vistas as energias médias do sistema nos regimes de Markovianidade RHP e não Markovianidade RHP, onde as respectivas temperaturas destes regimes são $T = 0.10\omega_0$ e $T = 0.33\omega_0$.

Equivalentemente, foram calculado os valores da medida ACHL, Eq.(5.48), resultando em $\mathcal{N}_{\text{ACHL}}^I = 0.0532$ para a temperatura $T = 0.10\omega_0$ e $\mathcal{N}_{\text{ACHL}}^I = 0.0058$ para a temperatura $T = 0.30\omega_0$. A função $f(t)$ da medida ACHL, Eq. (5.47), pode ser observada através da Fig. 7.

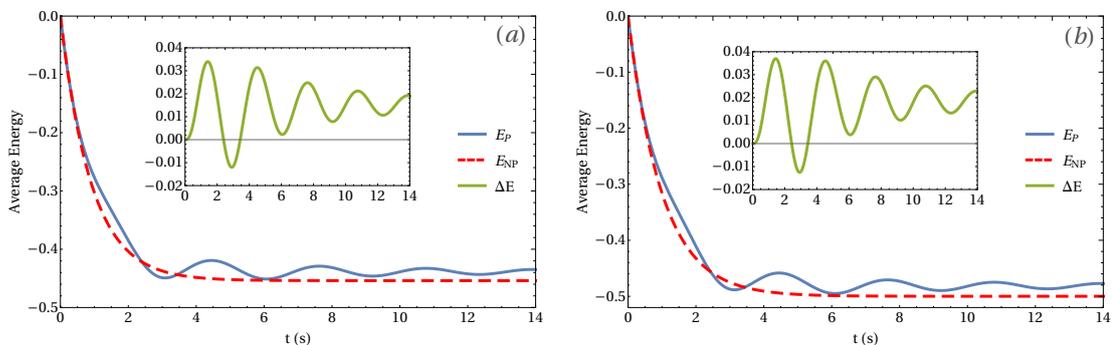


Figura 6 – Energia média do sistema, em unidades de ω_0 , com (E_P , linha sólida azul) e sem o bombeio de lei de potência (E_{NP} , linha tracejada vermelha). Inset: diferença das energias médias, $\Delta E = E_P - E_{NP}$. (a) Regime Markoviano RHP, com temperatura $T = 0.33\omega_0$ e (b) Regime não Markoviano RHP, com temperatura $T = 0.10\omega_0$. Os outros parâmetros usados nas curvas foram: $\Delta\omega = 2$, $\tau_c = 4.25$, $\Omega = 0.91$ e $\gamma = 1$. Devido a equivalência das energias média em ambos os regimes, sua variação para induzir não Markovianidade no sistema é pequena.

Fonte: Adaptada de COSTA-FILHO; LIMA; PAIVA; SOARES, MORGADO; FRANCO; SOARES-PINTO. (16)

6.6 Comparação entre os ruídos estocásticos

Por fim, nesta seção apresentaremos uma comparação entre as energias média e as medidas de não Markovianidade para os três ruídos estocásticos presentes. O coeficiente da equação mestra, $\gamma_1(t)$, pode ser visto na Fig. 8(a). Na Fig. 8(b), temos as energias média do sistema para a temperatura de $T = 0.10\omega_0$, isto é, no regime não Markoviano RHP.

Adicionalmente, foi feito o gráfico das medidas ACHL de não Markovianidade, onde na Fig. 9(a) temos a comparação utilizando os valores dos parâmetros conforme apresentados anteriormente nas seções 6.3, 6.4 e 6.5, para os ruídos exponencial (OU), Gaussiano (SE) e lei de potência (PL), respectivamente. Através da figura podemos notar que não há uma grande discrepância nos valores numéricos das medidas ACHL. Entretanto para uma melhor comparação das mesmas, foi feito um gráfico das medidas

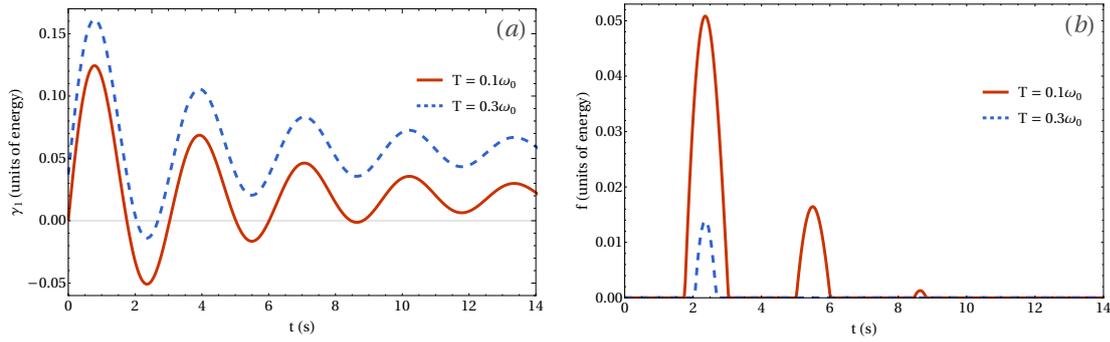


Figura 7 – (a) $\gamma_1(t)$ em função do tempo sobre a influência de um bombeio de lei de potência para o regime de não Markovianidade RHP, com temperaturas $T = 0.10\omega_0$ (linha sólida vermelha) e $T = 0.30\omega_0$ (linha tracejada azul). (b) $f(t)$ da medida ACHL em função do tempo, no mesmo regime, com as temperaturas $T = 0.10\omega_0$ (linha sólida vermelha) e $T = 0.30\omega_0$ (linha tracejada azul). Os valores da medida ACHL são $\mathcal{N}_{\text{ACHL}}^I = 0.0585$ e $\mathcal{N}_{\text{ACHL}}^I = 0.0040$. Os outros parâmetros usados nas curvas foram: $\Delta\omega = 2$, $\tau_c = 4.25$, $\Omega = 0.91$ e $\gamma = 1$.

Fonte: Adaptada de COSTA-FILHO; LIMA; PAIVA; SOARES, MORGADO; FRANCO; SOARES-PINTO. (16)

no qual utilizamos os parâmetros do ruído lei de potência para os três casos, que pode ser observado na Fig. 9(b). Vemos claramente que ao usar os parâmetros do ruído de lei de potência para os três casos, o ruído Gaussiano passa a gerar uma quantidade de não Markovianidade maior que os demais. Os valores numéricos de tais medidas podem ser vistos na Tabela 1.

Tabela 1 – Valores numéricos da medida ACHL para os três ruídos estocásticos. Na primeira coluna os valores usados foram: $\Delta\omega = 2$, $\tau_c = 4.25$, $\Omega = 0.91$ (OU), $\Delta\omega = 2$, $\tau_c = 4.25$, $\Omega = 0.47$ (SE) e $\Delta\omega = 2$, $\tau_c = 10$, $\Omega = 1.35$ (PL). Na terceira coluna foram usados os mesmos valores dos parâmetros para os três ruídos: $\Delta\omega = 2$, $\tau_c = 10$, $\Omega = 1.35$. Além disso, foi utilizado $\gamma = 1$ e $T = 0.10\omega_0$.

| Noise | Medida ACHL (parâmetros diferentes) | Medida ACHL (parâmetros iguais) |
|----------------------|--|------------------------------------|
| Exponencial (OU) | 0.0546 | 0.1047 |
| Gaussiano (SE) | 0.0585 | 0.1651 |
| Lei de potência (PL) | 0.0532 | 0.0532 |

Fonte: Adaptada de COSTA-FILHO; LIMA; PAIVA; SOARES, MORGADO; FRANCO; SOARES-PINTO. (16)

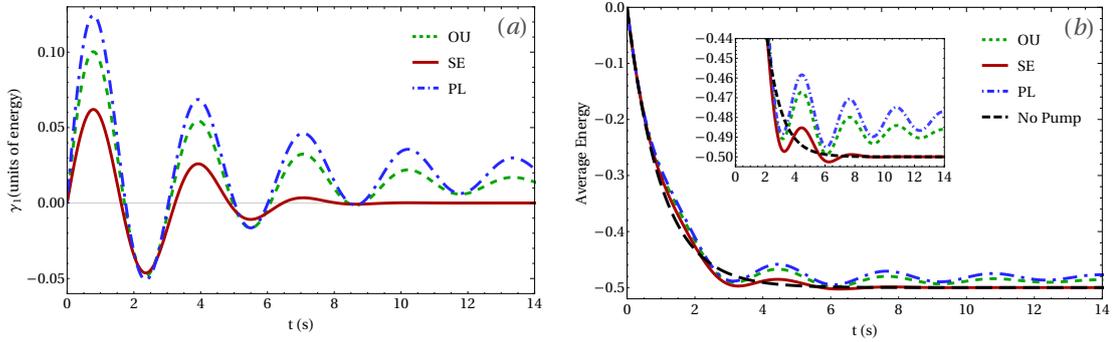


Figura 8 – (a) $\gamma_1(t)$ em função do tempo para o regime não Markoviano RHP e (b) Energias médias para os três ruídos estocásticos. Em ambos os casos foram usados os parâmetros: $\Delta\omega = 2$, $\tau_c = 4.25$, $\Omega = 0.91$ (OU, linha tracejada verde), $\Delta\omega = 2$, $\tau_c = 4.25$, $\Omega = 0.47$ (SE, linha sólida vermelha) e $\Delta\omega = 2$, $\tau_c = 10$, $\Omega = 1.35$ (PL, linha traço-ponto azul). Energia média sem o bombeio (linha tracejada longa preta). Inset: comparação das energias médias em uma melhor escala.
Fonte: Adaptada de COSTA-FILHO; LIMA; PAIVA; SOARES, MORGADO; FRANCO; SOARES-PINTO. (16)

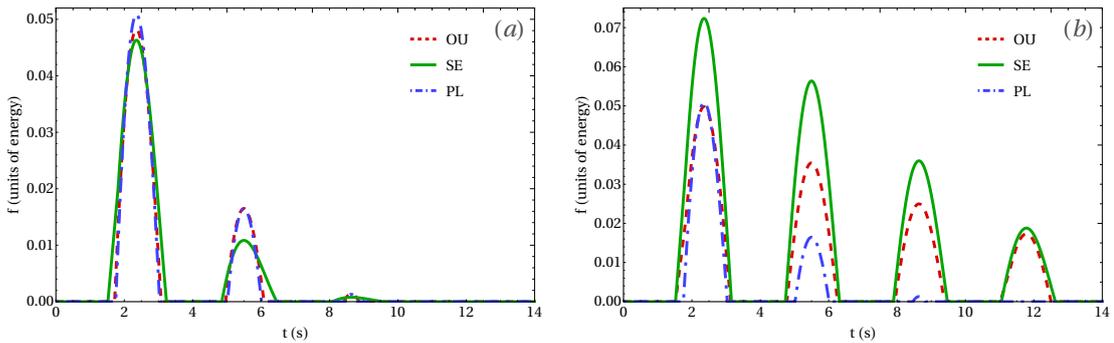


Figura 9 – Comparação da função $f(t)$ da medida ACHL para os três ruídos estocásticos presentes com temperaturas $T = 0.10\omega_0$. (a) Utilizando parâmetros diferentes para cada ruído: $\Delta\omega = 2$, $\tau_c = 4.25$, $\Omega = 0.91$ (OU, linha tracejada vermelha), $\Delta\omega = 2$, $\tau_c = 4.25$, $\Omega = 0.47$ (SE, linha sólida verde) e $\Delta\omega = 2$, $\tau_c = 10$, $\Omega = 1.35$ (PL, linha traço-ponto azul). (b) Utilizando os mesmo parâmetros para os três ruídos: $\Delta\omega = 2$, $\tau_c = 10$, $\Omega = 1.35$. Os outros parâmetros usados foram $\gamma = 1$ e $T = 0.10\omega_0$.
Fonte: Adaptada de COSTA-FILHO; LIMA; PAIVA; SOARES, MORGADO; FRANCO; SOARES-PINTO. (16)

7 CONTROLE DA NÃO MARKOVIANIDADE PELA DISSIPACÃO DE UM Q-BIT

Neste capítulo é apresentado um estudo sobre como é possível ocorrer a transição de um regime Markoviano para um não Markoviano, através do controle do tempo de relaxação de um q-bit auxiliar. Para isso, foi utilizado um sistema de dois níveis, na qual foi aplicado dois canais quânticos para simular a decoerência no sistema quântico. Tal modelo teórico foi aplicado a um experimento utilizando uma molécula de clorofórmio (CHCl_3). Como o átomo de cloro possui momento magnético zero, o átomo de ^{13}C atua como um sistema quântico enquanto que o átomo ^1H atua como um q-bit auxiliar. Com o uso do *Free Induction Decay* (FID) experimental e simulado teoricamente, foi possível estudar a transição não Markoviana aplicando a distância de traço como medida.

7.1 O Modelo - sistema de dois níveis

Nesta seção iremos apresentar a formulação teórica dos canais quânticos responsáveis pela simulação da decoerência no sistema. Conforme apresentado na Sec. 2.1, os operadores de Kraus simulam o efeito da decoerência do ambiente no sistema quântico. Sejam dois operadores densidade que representam o sistema quântico e o ambiente, respectivamente definidos por $\rho_S \in L(\mathcal{H}_S)$ e $\rho_B \in L(\mathcal{H}_B)$. A dinâmica total do sistema composto é calculada segundo a equação (47, 49)

$$\rho_{\text{SB}}(t) = \mathcal{E}[\rho_{\text{SB}}(t)] = U(t)(\rho_S \otimes \rho_B)U^\dagger(t), \quad (7.1)$$

em que supomos que o estado inicial é $\rho_{\text{SB}} = \rho_S \otimes \rho_B$. Como nosso foco é determinar a dinâmica do sistema, devemos eliminar os graus de liberdade do ambiente com o uso do traço parcial. Seja $\rho_B = |e_0\rangle\langle e_0|$, tal que $\{|e_k\rangle\} \in \mathcal{H}_B$ é uma base ortonormal do espaço de Hilbert do ambiente, a dinâmica do sistema pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \rho_S(t) &= \mathcal{E}[\rho_{\text{SB}}(t)] = \text{Tr}_A [U(t)(\rho_S \otimes \rho_B)U^\dagger(t)] \\ &= \sum_k \langle e_k | U | e_0 \rangle \rho_S \langle e_0 | U | e_k \rangle \\ &= \sum_k E_k \rho_S E_k^\dagger, \end{aligned} \quad (7.2)$$

na qual E_k são chamados de operadores de Kraus. Assim, o formalismo dos operadores de Kraus descreve a dinâmica do sistema quântico. (47, 49)

A seguir iremos apresentar a formulação teórica dos canais de atenuação de fase e do *bit-phase flip*. Tais canais são importantes nesse contexto, pois são capazes de simular a decoerência do estado de spin de uma molécula de clorofórmio.

7.1.1 Canal de atenuação de fase

Primeiramente vamos introduzir o canal de atenuação de fase. Conforme mencionado na Sec. 2.2.1, este canal descreve os processos em que temos perda de informação sem perda de energia. (47) Escrevendo a equação mestra para este modelo (3), como apresentado na Sec. 3.4.3

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i[H_S(t), \rho_S(t)] + \gamma[\sigma_z\rho_S(t)\sigma_z - \rho_S(t)], \quad (7.3)$$

em que σ_z é a matriz de Pauli, γ é o coeficiente da equação mestra e $H_S(t)$ representa o Hamiltoniano do sistema, dado por

$$H_S(t) = \frac{\omega_0}{2}\sigma_z, \quad (7.4)$$

sendo ω_0 a frequência do sistema. Para resolver a Eq. (7.3) podemos usar a representação de interação, pois ela transforma a equação em uma forma mais prática (128). Escrevendo o operador densidade nesta representação, temos

$$\tilde{\rho}_S(t) = e^{iH_S t} \rho_S(t) e^{-iH_S t} \Leftrightarrow \rho_S(t) = e^{-iH_S t} \tilde{\rho}_S(t) e^{iH_S t}. \quad (7.5)$$

Aplicando a transformação acima na Eq. (7.3), ela se torna

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\tilde{\rho}_S(t) &= \gamma[\sigma_z\tilde{\rho}_S(t)\sigma_z - \tilde{\rho}_S(t)] \\ &= \gamma \begin{pmatrix} 0 & -2\rho_{12}(0) \\ -2\rho_{21}(0) & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (7.6)$$

A equação acima nos retorna duas equações diferenciais. A primeira descreve a dinâmica das populações do operador densidade (termos diagonais), enquanto a segunda descreve a a dinâmica das coerências (termos fora da diagonal). Escrevendo ambas as equações, temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\tilde{\rho}_S^{(ii)}(t) &= 0 \Rightarrow \tilde{\rho}_S^{(ii)}(t) = \rho_S^{(ii)}(0), \\ \frac{d}{dt}\tilde{\rho}_S^{(ij)}(t) &= -2\tilde{\rho}_S^{(ij)}(t) \Rightarrow \tilde{\rho}_S^{(ij)}(t) = \rho_S^{(ij)}(0)e^{-2\gamma t}. \end{aligned} \quad (7.7)$$

Assim, a solução da Eq. (7.3) pode ser escrita da seguinte maneira

$$\tilde{\rho}_S(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(0) & e^{-2\gamma t}\rho_{12}(0) \\ e^{-2\gamma t}\rho_{21}(0) & \rho_{22}(0) \end{pmatrix}. \quad (7.8)$$

Considerando um tempo longo, o estado se reduz apenas às populações do operador densidade, conforme apresentado abaixo (128)

$$\tilde{\rho}_S(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(0) & e^{-2\gamma t}\rho_{12}(0) \\ e^{-2\gamma t}\rho_{21}(0) & \rho_{22}(0) \end{pmatrix} \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} \begin{pmatrix} \rho_{11}(0) & 0 \\ 0 & \rho_{22}(0) \end{pmatrix}, \quad (7.9)$$

evidenciando o fato de que as coerências do sistema são perdidas, restando apenas os termos das populações. Por isso, é dito que este canal quântico simula a perda de informação sem perda de energia^a. (47)

Utilizando agora os operadores de Kraus ou representação soma (47), vamos mostrar que tal formalismo nos leva ao mesmo resultado obtido na Eq. (7.8). Os operadores de Kraus para o canal de atenuação de fase podem ser escritos como (47)

$$E_0(t) = \sqrt{p} \mathbf{1} = \sqrt{p} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (7.10)$$

$$E_1(t) = \sqrt{1-p} \sigma_z = \sqrt{1-p} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (7.11)$$

Assim, a dinâmica do operador densidade pode ser escrita da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \rho_S(t) &= \sum_k E_k \rho_S E_k^\dagger = E_0 \rho_S E_0^\dagger + E_1 \rho_S E_1^\dagger \\ &= \begin{pmatrix} \rho_{11}(0) & (2p-1)\rho_{12}(0) \\ (2p-1)\rho_{21}(0) & \rho_{22}(0) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (7.12)$$

Parametrizando a probabilidade p como $2p-1 = e^{-2\gamma t}$, temos o mesmo resultado apresentado na Eq. (7.8). Assim, os operadores de Kraus são capazes de simular o canal de atenuação de fase.

7.1.2 Canal de *bit-phase flip*

Outro canal quântico que vamos apresentar é o canal chamado de *bit-phase flip*. (47) Este canal aplica um giro (*flip*) tanto no estado do q-bit como em sua fase. O canal pode ser visualizado realizando as seguintes operações no q-bit (129)

$$\begin{aligned} |0\rangle &\rightarrow i|1\rangle, \\ |1\rangle &\rightarrow -i|0\rangle. \end{aligned}$$

Escrevendo a equação mestra para este modelo na representação de interação, temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_S(t) &= \gamma [\sigma_y \rho_S(t) \sigma_y - \rho_S(t)] \\ &= \gamma \begin{pmatrix} -\rho_{11}(0) + \rho_{22}(0) & -\rho_{12}(0) - \rho_{21}(0) \\ -\rho_{12}(0) - \rho_{21}(0) & \rho_{11}(0) - \rho_{22}(0) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (7.13)$$

Usando a propriedade de que $\rho_{11}(0) + \rho_{22}(0) = 1$, podemos escrever a equação diferencial para o termo $\rho_{11}(t)$

$$\frac{d}{dt} \rho_{11}(t) = \gamma [1 - 2\rho_{11}(t)] \Rightarrow \rho_{11}(t) = \frac{1}{2} \left\{ 1 + e^{-2\gamma t} [2\rho_{11}(0) - 1] \right\}, \quad (7.14)$$

^aA energia do sistema depende apenas das populações do operador densidade.

e conseqüentemente o termo $\rho_{22}(t)$ é

$$\rho_{22}(t) = \frac{1}{2} \left\{ 1 + e^{-2\gamma t} [1 - 2\rho_{11}(0)] \right\}. \quad (7.15)$$

As coerências possuem as seguintes soluções^b

$$\frac{d}{dt}\rho_{12}(t) = -\gamma [\rho_{12}(t) + \rho_{21}(t)] \Rightarrow \rho_{12}(t) = \frac{1}{2} (A_0 e^{-2\gamma t} + B_0), \quad (7.16)$$

$$\frac{d}{dt}\rho_{21}(t) = -\gamma [\rho_{12}(t) + \rho_{21}(t)] \Rightarrow \rho_{21}(t) = \frac{1}{2} (A_0 e^{-2\gamma t} - B_0), \quad (7.17)$$

em que $A_0 = \rho_{12}(0) + \rho_{21}(0)$ e $B_0 = \rho_{12}(0) - \rho_{21}(0)$. A solução geral da Eq. (7.13) é então escrita da seguinte maneira

$$\rho_S(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + e^{-2\gamma t} [2\rho_{11}(0) - 1] & A_0 e^{-2\gamma t} + B_0 \\ A_0 e^{-2\gamma t} - B_0 & 1 - e^{-2\gamma t} [2\rho_{11}(0) - 1] \end{pmatrix} \quad (7.18)$$

No limite em que $t \rightarrow +\infty$, a Eq. (7.18) assume uma forma mais simples

$$\rho(t \rightarrow +\infty) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & B_0 \\ -B_0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (7.19)$$

em que as populações se estabilizam em um valor constante e são igualmente prováveis.

Usando agora o formalismo dos operadores de Kraus para o canal de *bit-phase flip* (47), temos

$$K_0 = \sqrt{q} \mathbf{1} = \sqrt{q} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (7.20)$$

$$K_1 = \sqrt{1-q} \sigma_y = \sqrt{1-q} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.21)$$

em que $1-q$ representa a probabilidade do q-bit permanecer no mesmo estado. Usando o formalismo do operador soma, a dinâmica do operador densidade é

$$\begin{aligned} \rho_S(t) &= \sum_n K_n \rho_S K_n^\dagger = K_0 \rho_S K_0^\dagger + K_1 \rho_S K_1^\dagger \\ &= \begin{pmatrix} (1-q)\rho_{22}(0) + q\rho_{11}(0) & (q-1)\rho_{21}(0) + q\rho_{12}(0) \\ (q-1)\rho_{12}(0) + q\rho_{21}(0) & (1-q)\rho_{11}(0) + q\rho_{22}(0) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (7.22)$$

Escolhendo o caso em que $q = 1/2$, ou seja, o q-bit tem igual probabilidade de trocar de estado ou permanecer inalterado. Assim, o operador densidade se torna

$$\rho_S(t, q = 1/2) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \rho_{12}(0) - \rho_{21}(0) \\ \rho_{21}(0) - \rho_{12}(0) & 1 \end{pmatrix}, \quad (7.23)$$

que é o mesmo resultado obtido na Eq. (7.18) no limite de tempos longos.

^bAs soluções das equações diferenciais responsáveis pelas coerências do sistema podem ser calculadas aplicando as transformações $a(t) = \rho_{12}(t) + \rho_{21}(t)$ e $b(t) = \rho_{12}(t) - \rho_{21}(t)$. Substituindo as transformações nas Eqs. (7.16) e (7.17), temos os resultados desejados.

7.1.3 Sistemas de dois q-bits

Vamos agora considerar um sistema de 2 q-bits, em que os dois canais apresentados anteriormente atuam de forma simultânea no sistema composto (q-bit 1 + q-bit 2). Além disso ambos os q-bits estão em contato com o ambiente/banho. O Hamiltoniano total deste modelo pode ser escrito como

$$H = H_1 + H_2 + H_{12} + H_B + H_{1B} + H_{2B}, \quad (7.24)$$

em que H_1 e H_2 governam o comportamento dos q-bits 1 e 2, H_{12} descreve a interação entre eles, H_B representa o termo do banho, H_{1B} e H_{2B} são os termos de interação do q-bit 1 com o banho e do q-bit 2 com o banho, respectivamente. Assumindo que o termo $H_{1B} = 0^c$ (130), o Hamiltoniano se torna

$$H = H_1 + H_2 + H_{12} + H_B + H_{2B}. \quad (7.25)$$

Como nosso interesse é na dinâmica do q-bit 1, ao aplicarmos o traço parcial e eliminarmos as variáveis do q-bit2, podemos dizer que os termos $H_2 + H_B + H_{2B}$ representam um banho efetivo com o q-bit 1. Como será visto na próxima seção, o termo de banho efetivo pode ser controlado adicionando-se impurezas magnéticas no sistema. (130–132)

7.2 Molécula de clorofórmio

Nesta seção será apresentado como é possível fazer a conexão entre o modelo teórico apresentado na Sec. 7.1 e a molécula de clorofórmio (CHCl_3), que pode ser vista como um sistema de dois q-bits. No caso os átomos de carbono e hidrogênio assumem o papel dos q-bits 1 e 2 (spins 1 e 2), respectivamente. As moléculas de clorofórmio foram diluídas em uma solução contendo impurezas magnéticas de tris(acetilacetato)ferro(III). Tais íons de Fe(III) criam campos estocásticos quando estes se aproximam das moléculas de CHCl_3 . (130) Vale mencionar que as impurezas afetam somente o átomo de ^1H , gerando um movimento de inversão (*flip*) dos spins. Já o átomo de ^{13}C não é afetado pelas impurezas magnéticas, pois ele é blindado pelos átomos de cloro (Cl), que possuem momento magnético nulo, e ficam ao redor dos átomos de ^{13}C , criando uma espécie de escudo. (130) A estrutura da molécula de clorofórmio pode ser vista na Fig. 10.

Portanto, a conexão entre o modelo teórico do sistema de dois níveis e a molécula de clorofórmio se dá através da seguinte relação

$$\begin{aligned} ^{13}\text{C} &\longleftrightarrow \text{spin1} \longleftrightarrow \text{atenuação de fase}, \\ ^1\text{H} &\longleftrightarrow \text{spin2} \longleftrightarrow \text{bit-phase flip}. \end{aligned}$$

^cComo vamos controlar o ambiente adicionando impurezas magnéticas, o q-bit 1 não é afetado por tal impurezas. Este fato ficará mais claro na Sec. 7.2 em que o q-bit 1 é associado com o átomo de ^{13}C , sendo este blindado pelos átomos de Cl e conseqüentemente não é afetado pelas impurezas magnéticas.

Como átomo de ^{13}C sofre o efeito da decoerência do banho, o canal de atenuação de fase foi aplicado para simular este efeito. Para o átomo de ^1H , as impurezas magnéticas geram inversões dos spins do núcleo, sendo simuladas pelo canal de *bit-phase flip*.

Como discutido na Sec. 7.1, a Eq. (7.25) apresenta o Hamiltoniano capaz de modelar o spin da molécula de clorofórmio

$$H = H_C + H_H + H_{\text{CH}} + H_B + H_{\text{HB}}, \quad (7.26)$$

sendo H_C e H_H os Hamiltonianos dos átomos de ^{13}C e ^1H , H_{CH} o termo de interação entre os spins, H_B representa o banho e H_{HB} é a interação do átomo de ^1H com banho. Entretanto, pode-se utilizar uma representação adequada do modelo na qual somente o termo de interação entre os spins se faz relevante, a qual é chamada de referencial duplo girante (vide apêndice D). (132, 133) O termo de interação pode ser escrito como

$$H_{\text{CH}} = \frac{2\pi J}{4} \sigma_C^z \otimes \sigma_H^z, \quad (7.27)$$

em que J é a constante de interação entre os spins dos átomos, dada em Hertz, e $\sigma_{\text{C,H}}^z$ são as matrizes de Pauli relacionadas com os átomos de ^{13}C e ^1H , respectivamente. Vale mencionar que foi adotado $\hbar = 1$ ao longo de todo o trabalho desenvolvido.

Reescrevendo o canal de atenuação de fase (47)

$$E_0(t) = \sqrt{p(t)} \mathbf{1}, \quad (7.28)$$

$$E_1(t) = \sqrt{1 - p(t)} \sigma_z, \quad (7.29)$$

$$p(t) = \frac{1 + e^{-t/(2\tau_C)}}{2}, \quad (7.30)$$

em que $p(t)$ é a probabilidade do spin e τ_C é o tempo de relaxação do spin do átomo de ^{13}C . Tal tempo de relaxação modula a decoerência do átomo de ^{13}C .

O canal de *bit-phase flip* é representado por (47)

$$K_0(t) = \sqrt{q(t)} \mathbf{1}, \quad (7.31)$$

$$K_1(t) = \sqrt{1 - q(t)} \sigma_y, \quad (7.32)$$

$$q(t) = \frac{1 + e^{-t/(2\tau_H)}}{2}, \quad (7.33)$$

onde $q(t)$ é a probabilidade do spin e τ_H é o tempo de relaxação do spin do átomo de ^1H . Observe o fato de que os operadores de ambos os canais são hermitianos, isto é,

$$E_0(t) = E_0^\dagger(t), \quad (7.34)$$

$$E_1(t) = E_1^\dagger(t), \quad (7.35)$$

$$K_0(t) = K_0^\dagger(t), \quad (7.36)$$

$$K_1(t) = K_1^\dagger(t). \quad (7.37)$$

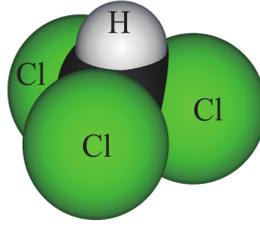


Figura 10 – Molécula de clorofórmio, onde temos um átomo de hidrogênio no topo, um átomo de carbono ao centro, rodeado por três átomos de cloro.

Fonte: KONDO; MATSUZAKI; MATSUSHIMA; FILGUEIRAS. (131)

Conforme mencionado anteriormente, as impurezas magnéticas criam campos magnéticos estocásticos que interagem somente com os átomos de ^1H . O número de interações é proporcional a quantidade de impurezas adicionadas. Assim, quanto mais sal paramagnético de tris(acetilacetato)ferro(III) for adicionado à solução, mais interações com os átomos de ^1H são geradas e conseqüentemente seu tempo de relaxação é modificado. Portanto, com o controle do τ_H podemos modificar a decoerência induzida no sistema. Como queremos somente a dinâmica do átomo de ^{13}C , ao eliminarmos as variáveis do átomo de ^1H , este funciona como um q-bit auxiliar, criando-se um banho efetivo para o ^{13}C . Através da variação do τ_H foi possível induzir a transição do regime Markoviano para o não Markoviano.

7.3 Simulação do FID e da distância de traço

Nesta seção será apresentada todo o processo de simulação do FID e da distância de traço. O FID aqui se torna importante, pois ele contém as informações sobre as coerências do sistema. Então, através dele é possível sabermos como ocorre a dinâmica da coerência e conseqüentemente, o processo de decoerência induzida no sistema. O FID é definido como

$$\text{FID} = \langle \sigma_x \rangle = \text{Tr}(\sigma_x \rho). \quad (7.38)$$

Supondo que o operador densidade é uma matriz 2x2, temos

$$\text{FID} = \text{Tr} \begin{pmatrix} \rho_{21} & \rho_{22} \\ \rho_{11} & \rho_{12} \end{pmatrix} = \rho_{12} + \rho_{21}, \quad (7.39)$$

mostrando assim que o FID carrega as informações das coerências.

Conforme discutido na Sec. 7.1, os canais de atenuação de fase e *bit-phase flip* são responsáveis pela indução de decoerência nos átomos de ^{13}C (spin 1) e ^1H (spin 2), respectivamente. Além disso, é possível controlar a não Markovianidade no sistema através do controle dos tempos de relaxação τ_H .

Seja ρ operador densidade total, a representação do canal de atenuação de fase

pode ser escrita como

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_C(\rho) &= E_0(t)\rho E_0^\dagger(t) + E_1(t)\rho E_1^\dagger(t) \\ &= p(t)\mathbf{1}\rho\mathbf{1} + [1 - p(t)]\sigma_z\rho\sigma_z,\end{aligned}\quad (7.40)$$

sendo E_k os operadores de Kraus para o canal de atenuação de fase e

$$p(t) = \frac{1 + e^{-t/(2\tau_C)}}{2}.\quad (7.41)$$

Para o canal de *bit-phase flip* temos um mapa quântico equivalente, definido como

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_H(\rho) &= K_0(t)\rho K_0^\dagger(t) + K_1(t)\rho K_1^\dagger(t) \\ &= q(t)\sigma_0\rho\sigma_0 + [1 - q(t)]\sigma_y\rho\sigma_y,\end{aligned}\quad (7.42)$$

sendo K_j os operadores de Kraus e

$$q(t) = \frac{1 + e^{-t/(2\tau_H)}}{2}.\quad (7.43)$$

Combinando os dois canais quânticos temos a dinâmica total do operador densidade. Entretanto, como a dinâmica total atua no espaço de Hilbert conjunto do spin 1 (^{13}C) e spin 2 (^1H), $\mathcal{H} = \mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_H$, devemos expandir a dimensão dos operadores de Kraus, conforme segue abaixo

$$E_0(t) = \sqrt{p(t)}\mathbf{1} \otimes \mathbf{1},\quad (7.44)$$

$$E_1(t) = \sqrt{1 - p(t)}\sigma_z \otimes \mathbf{1},\quad (7.45)$$

$$K_0(t) = \sqrt{q(t)}\mathbf{1} \otimes \mathbf{1},\quad (7.46)$$

$$K_1(t) = \sqrt{1 - q(t)}\mathbf{1} \otimes \sigma_y,\quad (7.47)$$

em que durante toda a dinâmica vamos respeitar a composição dos subespaços $^{13}\text{C} \otimes ^1\text{H}$. O operador densidade pode ser escrito então como

$$\rho = \sum_{j=0,1} \sum_{k=0,1} K_j(t)E_k(t)\rho E_k^\dagger(t)K_j^\dagger(t).\quad (7.48)$$

Todavia, a Eq. (7.48) não é suficiente para descrever toda a dinâmica, devemos ainda adicionar o termo de acoplamento escalar devido a interação entre os dois átomos. Assim, a Eq. (7.48) se torna

$$\rho(t) = \sum_{j=0,1} \sum_{k=0,1} K_j(t)E_k(t)U(t)\rho(0)U^\dagger(t)E_k^\dagger(t)K_j^\dagger(t),\quad (7.49)$$

em que $U(t)$ é operador evolução temporal e atua em ambos espaços de Hilbert (^{13}C e ^1H)

$$U(t) = e^{-iH_{\text{CH}}t}, \quad H_{\text{CH}} = \frac{2\pi J}{4}\sigma_C^z \otimes \sigma_H^z.\quad (7.50)$$

Para calcular o FID e a distância de traço basta usar a Eq. (7.49), mas estamos interessados somente na dinâmica do átomo de ^{13}C , pois desta forma o átomo de ^1H atua como um q-bit auxiliar e se acopla ao banho criando assim um banho efetivo. A não Markovianidade é então gerada devido ao acoplamento entre o átomo de ^{13}C e o ambiente efetivo. Com isso em mente, temos que eliminar os graus de liberdade do átomo de ^1H através do uso do traço parcial. Aplicando isto na Eq. (7.49), temos

$$\begin{aligned}\rho_{\text{C}}(t) &= \sum_{j=0,1} \sum_{k=0,1} \text{Tr}_{\text{H}} \left[K_j(t) E_k U(t) \rho(0) U^\dagger(t) E_k^\dagger(t) K_j^\dagger(t) \right] \\ &= \text{Tr}_{\text{H}} \left[K_0(t) E_0(t) U(t) \rho(0) U^\dagger(t) E_0^\dagger(t) K_0^\dagger(t) \right] \\ &+ \text{Tr}_{\text{H}} \left[K_0(t) E_1(t) U(t) \rho(0) U^\dagger(t) E_1^\dagger(t) K_0^\dagger(t) \right] \\ &+ \text{Tr}_{\text{H}} \left[K_1(t) E_0(t) U(t) \rho(0) U^\dagger(t) E_0^\dagger(t) K_1^\dagger(t) \right] \\ &+ \text{Tr}_{\text{H}} \left[K_1(t) E_1(t) U(t) \rho(0) U^\dagger(t) E_1^\dagger(t) K_1^\dagger(t) \right],\end{aligned}\quad (7.51)$$

em que $\text{Tr}_{\text{H}}(\dots)$ denota o traço parcial sobre as variáveis do ^1H . O cálculo do FID para o átomo de ^{13}C é definido como

$$\text{FID}_{\text{C}}(t) = \langle \sigma_x \rangle = \text{Tr} [\sigma_x \rho_{\text{C}}(t)]. \quad (7.52)$$

A distância de traço pode ser calculada a partir de dois estados iniciais dados. Seja $\rho_1(0)$ e $\rho_2(0)$ dois estados iniciais dado por

$$\rho_{\text{C}}^1(0) = |+\rangle \langle +| \otimes \frac{\mathbf{1}}{2}, \quad (7.53)$$

$$\rho_{\text{C}}^2(0) = |-\rangle \langle -| \otimes \frac{\mathbf{1}}{2}, \quad (7.54)$$

sendo os estados

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle \pm |1\rangle). \quad (7.55)$$

A distância de traço para estes dois estados iniciais é dada por

$$\begin{aligned}D[\rho_{\text{C}}^1(t), \rho_{\text{C}}^2(t)] &= \frac{1}{2} \left| \langle \sigma_x \rangle_{\rho_{\text{C}}^1} - \langle \sigma_x \rangle_{\rho_{\text{C}}^2} \right| \\ &= \frac{1}{2} \left| \text{FID}_{\text{C}}^1(t) - \text{FID}_{\text{C}}^2(t) \right|,\end{aligned}\quad (7.56)$$

em que $\text{FID}_{\text{C}}^{1,2}(t)$ são referentes aos estados iniciais $\rho_{\text{C}}^{1,2}(0)$, respectivamente.

Entretanto, para os cálculos das simulações do $\rho_{\text{C}}(t)$ e $\text{FID}_{\text{C}}(t)$, foi utilizado uma discretização do tempo em que o estado final passa a ser seu novo estado inicial. A dinâmica do operador densidade da Eq. (7.49) de um tempo inicial $t = 0$ até um tempo final $t = t_{\text{max}}$ é dado por

$$\rho(t_{i+1}) = \sum_{l=0,1} \sum_{k=0,1} K_l(\Delta t) E_k(\Delta t) U(\Delta t) \rho(t_i) U^\dagger(\Delta t) E_k^\dagger(\Delta t) K_l^\dagger(\Delta t), \quad (7.57)$$

sendo Δt o passo da evolução temporal, $t_i = i\Delta t$ o i -ésimo passo e $\rho(t_i)$ é o estado em $t = t_i$. Aplicando o mesmo princípio de discretização para o operador densidade do átomo de carbono, $\rho_C(t)$, a dinâmica se dá por meio da seguinte evolução

$$\rho_C(0) \rightarrow \rho_C(\Delta t) \rightarrow \rho_C(2\Delta t) \rightarrow \dots \rightarrow \rho_C(t_{\max}). \quad (7.58)$$

Consequentemente tanto o $\text{FID}_C(t)$ como $D[\rho_C^1(t), \rho_C^2(t)]$ são obtidos numericamente através dos valores calculados para o operador $\rho_C(\Delta t)$.

7.4 Resultados

Nesta seção serão apresentados os resultados teóricos obtidos com as simulações e sua comparação com os dados experimentais. Os valores experimentais e teóricos, obtidos através das simulações, dos tempos de relaxação τ_C e τ_H para diversos valores de concentração de Fe(III) (impurezas magnéticas) se encontram na Tab. 2.

O comportamento oscilatório do $\text{FID}_C^1(t)$ é devido ao termo de interação H_{CH} , fato que pode ser visto na Fig. 11(a). Adicionalmente, o decaimento da amplitude indica a presença da decoerência no átomo de ^{13}C . Na Fig. 11(b), temos a distância de traço em função do átomo de ^{13}C em que foi considerado os dois estados iniciais

$$\rho_1(0) = |+\rangle \langle +| \otimes \frac{\mathbb{1}}{2}, \quad (7.59)$$

$$\rho_1(0) = |+\rangle \langle +| \otimes \frac{\mathbb{1}}{2}, \quad (7.60)$$

conforme mencionado anteriormente. Podemos observar que a distância de traço também apresenta um comportamento oscilatório e estas oscilações são relacionadas com o retorno de parte da informação perdida pelo sistema devido a decoerência, gerando assim a não Markovianidade BLP, conforme discutido na Sec. 5.3.2.

As impurezas magnéticas criam campos estocásticos que interagem com os átomos de ^1H , sendo que o quantidade de interações é proporcional a concentração de Fe(III) na solução. Assim, é possível modificarmos o tempo de relaxação τ_H através da adição das impurezas e consequentemente controlar a decoerência induzida no sistema. Nosso objetivo aqui é analisar a dinâmica do átomo de ^{13}C , o que faz com que o ^1H funcione como um q-bit auxiliar e acopla-se ao ambiente, criando um banho efetivo para o ^{13}C . A variação dos valores de τ_H em função do aumento da concentração de impurezas se encontram na Tab. 2. Assim, por meio do controle dos tempos τ_H fomos capazes de gerar uma transição entre os regimes Markoviano e nao Markoviano BLP, conforme pode ser observado nas Figs. 11-15(b). Essa transição entre os regimes vem do fato de que com a diminuição do tempo de relaxação τ_H , as oscilações do FID diminuem e consequentemente as inflexões nas curvas da distância de traço também diminuem. Elas vão diminuindo até chegar ao ponto que a distância de traço apresenta um comportamento monotonicamente

decrecente (sem inflexões). Então, a variação de τ_H fez com que o sistema passasse de um regime não Markoviano BLP (com inflexões na distância de traço, Figs. 11-14(b)) para um regime não Markoviano BLP (sem inflexões, Fig. 15(b)). Como descrito na definição 8, este aspecto representa que o sistema se encontra em um regime Markoviano BLP, pois neste caso não temos nenhum retorno de parte da informação perdida pelo sistema (os estados iniciais do sistema somente vão se afastando). Isto ocorre, pois para tempos de relaxação curtos, a não Markovianidade BLP do sistema desaparece conforme as interações com o reservatório se tornam mais fortes que o termo do acoplamento escalar J . Neste ponto, o sistema praticamente sofre a influência da decoerência induzida pelo banho.

Ainda, podemos observar que os resultados experimentais ficaram próximos dos valores teóricos, sendo assim que o modelo teórico proposto se mostrou válido para simular corretamente a dinâmica dos spins de uma molécula de CHCl_3 , por meio da formulação de canais quânticos. Além disso, foi discutido como os aspectos de não Markovianidade do sistema se comportam quando o mecanismo de relaxação é modificado (pela variação dos tempos τ_H) pela ação de um campo magnético externo (criado devido as impurezas magnéticas) de um q-bit auxiliar.

Um fato que vale a pena ser mencionado é que os resultados teóricos da distância de traço apresentaram um maior desvio em relação aos valores experimentais. Isso ocorre pois, para os estados iniciais escolhidos a distância de traço simplesmente se torna o módulo da diferença entre os FIDs de ambos os estados. Como os dados experimentais dos FIDs já possuem uma discrepância, ainda que pequena, em relação aos valores teóricos simulados, ao calcularmos a distância de traço estamos somando os erros associados aos FIDs. Porém, ainda assim os valores experimentais e teóricos se mostraram próximos.

Tabela 2 – Valores numéricos experimentais e teóricos dos tempos de relaxação τ_H e τ_C para diversas concentrações de Fe(III) (impurezas magnéticas).

| [Fe(III)] (mM) | Experimental | | Teórico | |
|----------------|---------------|---------------|---------------|---------------|
| | τ_H (ms) | τ_C (ms) | τ_H (ms) | τ_C (ms) |
| 20 | 14.00 | 98.00 | 10.00 | 90.00 |
| 50 | 5.00 | 55.00 | 4.00 | 50.00 |
| 120 | 2.00 | 28.00 | 1.50 | 30.00 |
| 300 | 0.90 | 11.00 | 0.80 | 11.00 |
| 450 | 0.53 | 5.40 | 0.40 | 5.00 |

Fonte: Elaborada pelo autor.

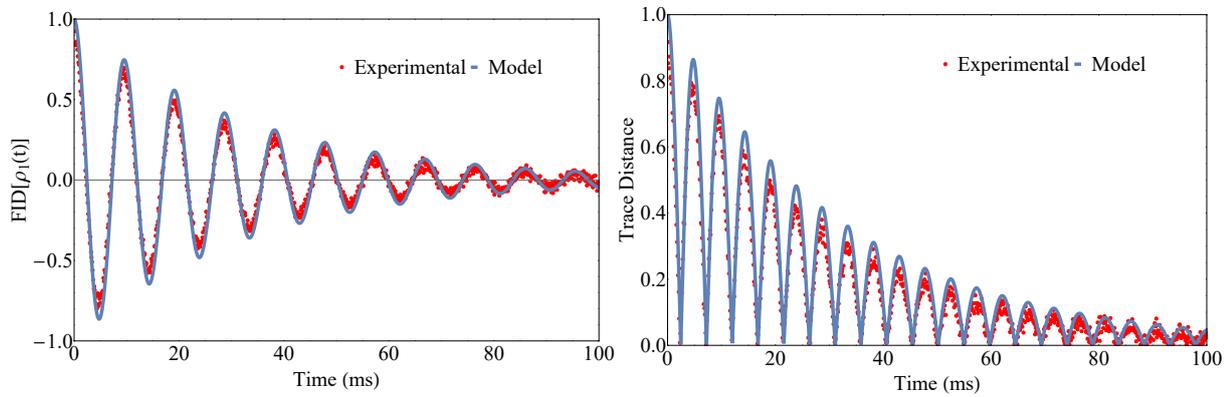


Figura 11 – (color online) Simulação teórica (linha sólida azul) e dados experimentais (círculos vermelhos) para a concentração de Fe(III) de 20 mM (a) $FID_1^C(t)$ do átomo de ^{13}C em função do tempo, usando o estado inicial $\rho_1(0) = |+\rangle\langle +| \otimes \sigma_0/2$. (b) $D[\rho_1^C(t), \rho_2^C(t)]$ em função do tempo. Os parâmetros experimentais são: $\tau_H = 14$ ms and $\tau_C = 98$ ms. Os parâmetros teóricos são: $\tau_H = 10$ ms and $\tau_C = 90$ ms. Em ambos os casos foi usado $J = 209.53$ Hz.

Fonte: Elaborada pelo autor.

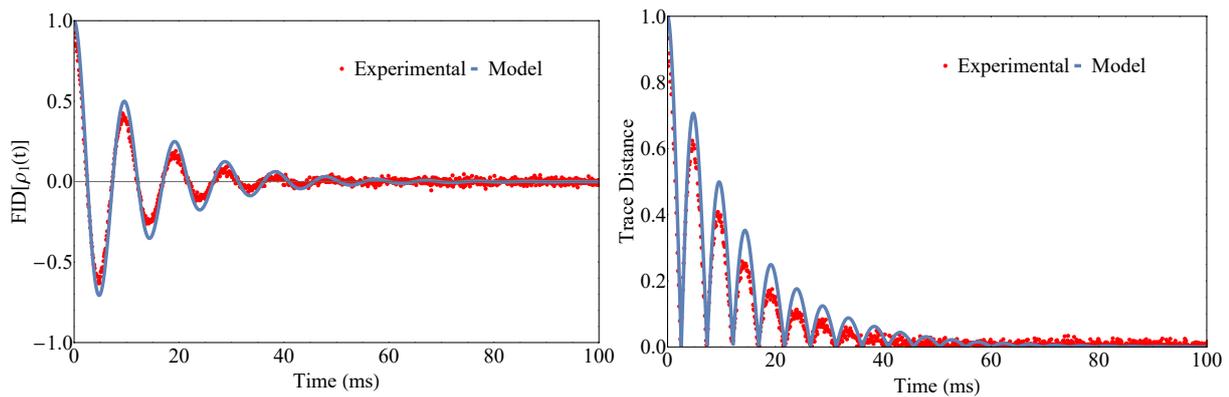


Figura 12 – (color online) Simulação teórica (linha sólida azul) e dados experimentais (círculos vermelhos) para a concentração de Fe(III) de 50 mM (a) $FID_1^C(t)$ do átomo de ^{13}C em função do tempo, usando o estado inicial $\rho_1(0) = |+\rangle\langle +| \otimes \sigma_0/2$. (b) $D[\rho_1^C(t), \rho_2^C(t)]$ em função do tempo. Os parâmetros experimentais são: $\tau_H = 5$ ms and $\tau_C = 55$ ms. Os parâmetros teóricos são: $\tau_H = 4$ ms and $\tau_C = 50$ ms. Em ambos os casos foi usado $J = 209.53$ Hz.

Fonte: Elaborada pelo autor.

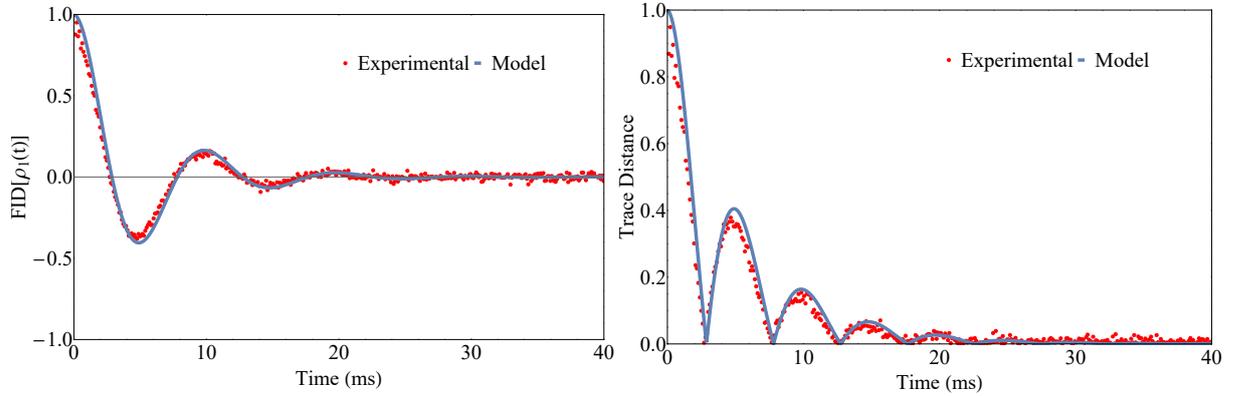


Figura 13 – (color online) Simulação teórica (linha sólida azul) e dados experimentais (círculos vermelhos) para a concentração de Fe(III) de 120 mM (a) $FID_1^C(t)$ do átomo de ^{13}C em função do tempo, usando o estado inicial $\rho_1(0) = |+\rangle\langle +| \otimes \sigma_0/2$. (b) $D[\rho_1^C(t), \rho_2^C(t)]$ em função do tempo. Os parâmetros experimentais são: $\tau_H = 2.0$ ms and $\tau_C = 28.0$ ms. Os parâmetros teóricos são: $\tau_H = 1.5$ ms and $\tau_C = 30.0$ ms. Em ambos os casos foi usado $J = 209.53$ Hz.

Fonte: Elaborada pelo autor.

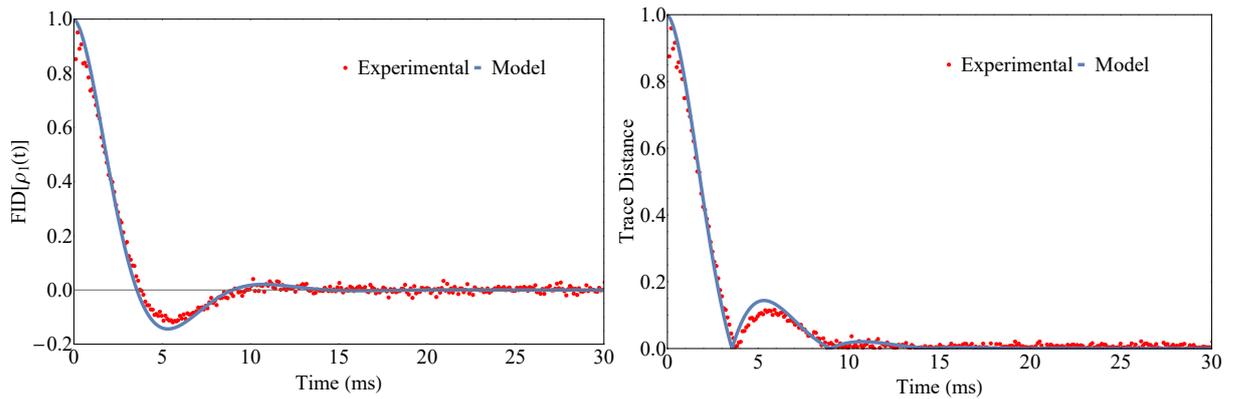


Figura 14 – (color online) Simulação teórica (linha sólida azul) e dados experimentais (círculos vermelhos) para a concentração de Fe(III) de 300 mM (a) $FID_1^C(t)$ do átomo de ^{13}C em função do tempo, usando o estado inicial $\rho_1(0) = |+\rangle\langle +| \otimes \sigma_0/2$. (b) $D[\rho_1^C(t), \rho_2^C(t)]$ em função do tempo. Os parâmetros experimentais são: $\tau_H = 0.9$ ms and $\tau_C = 11.0$ ms. Os parâmetros teóricos são: $\tau_H = 0.8$ ms and $\tau_C = 11.0$ ms. Em ambos os casos foi usado $J = 209.53$ Hz.

Fonte: Elaborada pelo autor.

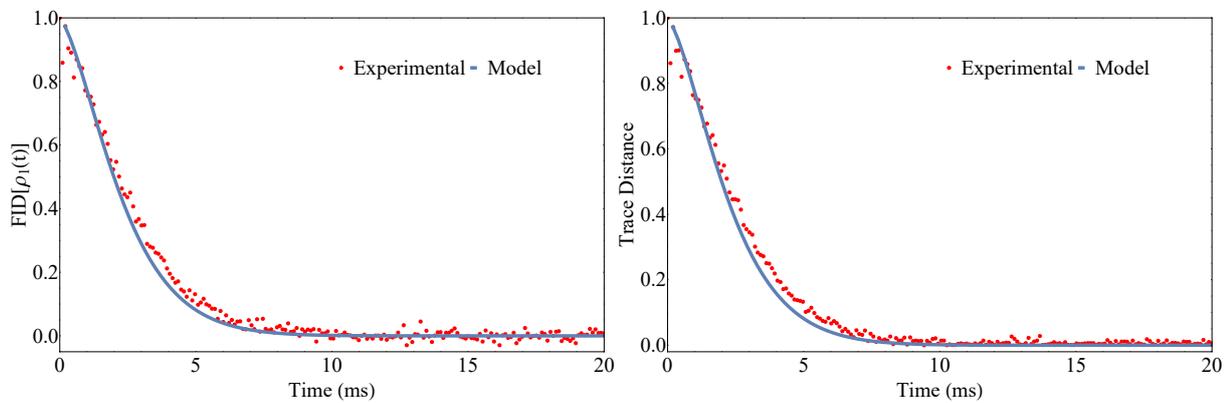


Figura 15 – (color online) Simulação teórica (linha sólida azul) e dados experimentais (círculos vermelhos) para a concentração de Fe(III) de 450 mM (a) $\text{FID}_1^C(t)$ do átomo de ^{13}C em função do tempo, usando o estado inicial $\rho_1(0) = |+\rangle\langle+| \otimes \sigma_0/2$. (b) $D[\rho_1^C(t), \rho_2^C(t)]$ em função do tempo. Os parâmetros experimentais são: $\tau_H = 0.53$ ms and $\tau_C = 54.00$ ms. Os parâmetros teóricos são: $\tau_H = 0.40$ ms and $\tau_C = 50.00$ ms. Em ambos os casos foi usado $J = 209.53$ Hz.

Fonte: Elaborada pelo autor.

8 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

O objetivo desta tese é propor métodos, analisar, compreender e controlar a transição Markoviana/não Markoviana na dinâmica de um sistema quântico aberto.

Na primeira parte apresentamos como através de um bombeio estocástico clássico, a dinâmica de um sistema quântico é alterada, gerando assim não Markovianidade. No caso, foi utilizado um sistema quântico em contato com um reservatório bosônico e sob a influência de um ruído clássico. Desta maneira, surgem os acoplamentos do sistema com o reservatório e o ruído, que podemos denominar de acoplamento efetivo. Devido a este acoplamento efetivo, pode-se definir uma temperatura de Markovianidade, que representa a temperatura limite em que o sistema é Markoviano, sendo não Markoviano para temperaturas menores. Conforme apresentado na seção 6.3, essa temperatura possui o valor de $T = 0.33\omega_0$.

Para análise dos resultados foram usados três ruídos: exponencial, Gaussiano e lei de potência (127), em que aplicamos a medida de não Markovianidade ACHL (46), considerando a temperatura de $T = 0.10\omega_0$. Conforme foi observado, para os regimes de parâmetros diferentes o ruído lei de potência apresenta um maior valor da medida enquanto ao utilizarmos os mesmos parâmetros para os três ruídos, o Gaussiano passou a gerar mais não Markovianidade se comparado aos outros. Além disso, foi mostrado que as energias médias do sistema, com e sem o bombeio estocástico, não variam muito. Assim, o custo energético para gerar não Markovianidade no sistema é baixo.

Seria interessante ainda aplicar diferentes densidades espectrais ao sistema e analisar como o mesmo se comportaria do ponto de vista da energia média e produção de não Markovianidade. Além disso, seria interessante analisarmos o sistema do ponto de vista da termodinâmica quântica e observar como o calor ou a entropia do sistema, por exemplo, se comporta no regime não Markoviano.

Na segunda parte, foi mostrado um estudo sobre como é possível gerar uma transição de um regime Markoviano BLP para um não Markoviano BLP de uma molécula de CHCl_3 , através do controle de um parâmetro externo. Para isso, foi usado a formulação de canais quânticos para simular a decoerência induzida no sistema devido ao seu acoplamento com o banho, sendo que os canais escolhidos foram o de atenuação de fase e *bit-phase flip*. Ainda, nós emulamos experimentalmente o efeito da decoerência usando uma molécula de CHCl_3 , em que impurezas magnéticas de acetilacetato Fe(III) foram adicionadas. Devido ao fato que o átomo de cloro possui momento magnético nulo e estão ao redor do átomo de ^{13}C , este não sofre a influência das interações geradas pelas impurezas. Nosso objetivo é analisar a dinâmica do ^{13}C , então ao eliminarmos as variáveis do ^1H , este atua

como um banho artificial e pode ser manipulado através da variação do controle do tempo de relaxação T_H . Por fim, com os dados experimentais e teóricos do *Free Induction Decay* (FID), foi possível aplicar a distância de traço como uma medida de não Markovianidade.

Conforme visto na Sec. 7.4, os valores teóricos e experimentais se mostraram próximos, sendo assim, podemos afirmar que tal modelo se mostrou válido ao objetivo proposto.

Seria interessante aplicar este modelo da molécula de CHCl_3 no estudo do *Quantum Speed Limit* (QSL) e verificar como a influência da não Markovianidade altera o aspecto do QSL.

REFERÊNCIAS

- 1 ISAR, A.; SANDULESCU, A.; SCHEID, W. Phase space representation for open quantum systems within the Lindblad theory. **International Journal of Modern Physics B**, World Scientific, v. 10, n. 22, p. 2767–2779, 1996.
- 2 BREUER, H.-P.; PETRUCCIONE, F. **The theory of open quantum systems**. New York: Oxford University Press, 2002.
- 3 RIVAS, A.; HUELGA, S. F. **Open quantum systems**. Berlin: Springer, 2012.
- 4 DAVIES, E. B. **Quantum theory of open systems**. New York: Academic Press, 1976.
- 5 CARMICHAEL, H. **An open systems approach to quantum optics**: lectures presented at the université libre de bruxelles, october 28 to november 4, 1991. Berlin: Springer, 2009. (Lectures notes in physics monographs, v.18).
- 6 ALICKI, R.; LENDI, K. **Quantum dynamical semigroups and applications**. Berlin: Springer, 2007. (Lectures notes in physics).
- 7 BAN, M. Photon-echo technique for reducing the decoherence of a quantum bit. **Journal of Modern Optics**, Taylor & Francis, v. 45, n. 11, p. 2315–2325, 1998.
- 8 VIOLA, L.; LLOYD, S. Dynamical suppression of decoherence in two-state quantum systems. **Physical Review A**, APS, v. 58, n. 4, p. 2733, 1998.
- 9 DUAN, L.-M.; GUO, G.-C. Suppressing environmental noise in quantum computation through pulse control. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 261, n. 3, p. 139–144, 1999.
- 10 VIOLA, L.; KNILL, E.; LLOYD, S. Dynamical decoupling of open quantum systems. **Physical Review Letters**, APS, v. 82, n. 12, p. 2417, 1999.
- 11 VIOLA, L.; LLOYD, S.; KNILL, E. Universal control of decoupled quantum systems. **Physical Review Letters**, APS, v. 83, n. 23, p. 4888, 1999.
- 12 TIAN, L.; LLOYD, S. Resonant cancellation of off-resonant effects in a multilevel qubit. **Physical Review A**, APS, v. 62, n. 5, p. 050301, 2000.
- 13 GUTMANN, H.; WILHELM, F.; KAMINSKY, W.; LLOYD, S. **Bang-Bang refocusing of a qubit exposed to telegraph noise in experimental aspects of quantum computing**. New York: Springer, 2005.
- 14 UCHIYAMA, C.; AIHARA, M. Synchronized pulse control of decoherence. **Physical Review A**, APS, v. 68, n. 5, p. 052302, 2003.
- 15 LEVITT, M. H. **Spin dynamics**: basics of nuclear magnetic resonance. New York: John Wiley & Sons, 2001.
- 16 COSTA-FILHO, J.; LIMA, R.; PAIVA, R.; SOARES, P.; MORGADO, W.; FRANCO, R. L.; SOARES-PINTO, D. Enabling quantum non-Markovian dynamics by injection of classical colored noise. **Physical Review A**, APS, v. 95, n. 5, p. 052126, 2017.

- 17 RIVAS, A.; HUELGA, S. F.; PLENIO, M. B. Quantum non-Markovianity: characterization, quantification and detection. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 77, n. 9, p. 094001, 2014.
- 18 BREUER, H.-P.; LAINE, E.-M.; PIILO, J.; VACCHINI, B. Colloquium: non-Markovian dynamics in open quantum systems. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 88, n. 2, p. 021002, 2016.
- 19 RIVAS, Á.; HUELGA, S. F.; PLENIO, M. B. Entanglement and non-Markovianity of quantum evolutions. **Physical Review Letters**, APS, v. 105, n. 5, p. 050403, 2010.
- 20 BYLICKA, B.; CHRUSCINSKI, D.; MANISCALCO, S. Non-Markovianity and reservoir memory of quantum channels: a quantum information theory perspective. **Scientific Reports**, Nature Publishing Group, v. 4, p. 5720, 2014.
- 21 ADDIS, C.; BYLICKA, B.; CHRUSCINSKI, D.; MANISCALCO, S. Comparative study of non-Markovianity measures in exactly solvable one-and two-qubit models. **Physical Review A**, APS, v. 90, n. 5, p. 052103, 2014.
- 22 LEGGIO, B.; FRANCO, R. L.; SOARES-PINTO, D. O.; HORODECKI, P.; COMPAGNO, G. Distributed correlations and information flows within a hybrid multipartite quantum-classical system. **Physical Review A**, APS, v. 92, n. 3, p. 032311, 2015.
- 23 WOLF, M. M.; EISERT, J.; CUBITT, T.; CIRAC, J. I. Assessing non-Markovian quantum dynamics. **Physical Review Letters**, APS, v. 101, n. 15, p. 150402, 2008.
- 24 PIILO, J.; MANISCALCO, S.; HÄRKÖNEN, K.; SUOMINEN, K.-A. Non-Markovian quantum jumps. **Physical Review Letters**, APS, v. 100, n. 18, p. 180402, 2008.
- 25 VEGA, I. de; ALONSO, D. Dynamics of non-Markovian open quantum systems. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 89, n. 1, p. 015001, 2017.
- 26 POLLOCK, F. A.; RODRÍGUEZ-ROSARIO, C.; FRAUENHEIM, T.; PATER-NOSTRO, M.; MODI, K. **Complete framework for efficient characterisation of non-Markovian processes**. 2015. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/1512.00589.pdf>. Acesso em 23 jan. 2019.
- 27 BRITO, F.; WERLANG, T. A knob for Markovianity. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 17, n. 7, p. 072001, 2015.
- 28 JOOS, E.; ZEH, H. D.; KIEFER, C.; GIULINI, D. J.; KUPSCH, J.; STAMATESCU, I.-O. **Decoherence and the appearance of a classical world in quantum theory**. Berlin: Springer Science, 2013.
- 29 ZUREK, W. H. Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 75, n. 3, p. 715, 2003.
- 30 GUARNIERI, G.; UCHIYAMA, C.; VACCHINI, B. Energy backflow and non-Markovian dynamics. **Physical Review A**, APS, v. 93, n. 1, p. 012118, 2016.
- 31 DEFFNER, S.; LUTZ, E. Quantum speed limit for non-markovian dynamics. **Physical Review Letters**, APS, v. 111, n. 1, p. 010402, 2013.

-
- 32 CHIN, A. W.; HUELGA, S. F.; PLENIO, M. B. Quantum metrology in non-Markovian environments. **Physical Review Letters**, APS, v. 109, n. 23, p. 233601, 2012.
- 33 VASILE, R.; OLIVARES, S.; PARIS, M. A.; MANISCALCO, S. Continuous-variable quantum key distribution in non-Markovian channels. **Physical Review A**, APS, v. 83, n. 4, p. 042321, 2011.
- 34 SCHMIDT, R.; NEGRETTI, A.; ANKERHOLD, J.; CALARCO, T.; STOCKBURGER, J. T. Optimal control of open quantum systems: cooperative effects of driving and dissipation. **Physical Review Letters**, APS, v. 107, n. 13, p. 130404, 2011.
- 35 XIONG, H.-N.; ZHANG, W.-M.; WANG, X.; WU, M.-H. Exact non-Markovian cavity dynamics strongly coupled to a reservoir. **Physical Review A**, APS, v. 82, n. 1, p. 012105, 2010.
- 36 BATALHÃO, T. B.; NETO, G. de M.; PONTE, M. de; MOUSSA, M. H. Y. Nonperturbative approach to system-reservoir dynamics in the strong-coupling regime and non-Markovian dynamics. **Physical Review A**, APS, v. 90, n. 3, p. 032105, 2014.
- 37 KROVI, H.; ORESHKOV, O.; RYAZANOV, M.; LIDAR, D. A. Non-Markovian dynamics of a qubit coupled to an ising spin bath. **Physical Review A**, APS, v. 76, n. 5, p. 052117, 2007.
- 38 CHIN, A.; PRIOR, J.; ROSENBAACH, R.; CAYCEDO-SOLER, F.; HUELGA, S.; PLENIO, M. The role of non-equilibrium vibrational structures in electronic coherence and recoherence in pigment-protein complexes. **Nature Physics**, Nature Research, v. 9, n. 2, p. 113–118, 2013.
- 39 ACCARDI, L. Quantum stochastic processes: *In*: FRITZ, J; JAFFE, A.; SZÁSZ, D. (ed). **Statistical physics and dynamical systems**. Boston: Springer, 1985. p. 285-302.
- 40 HAIKKA, P.; CRESSER, J. D.; MANISCALCO, S. Comparing different non-Markovianity measures in a driven qubit system. **Physical Review A**, APS, v. 83, n. 1, p. 012112, 2011.
- 41 NETO, A. C.; KARPAT, G.; FANCHINI, F. F. Inequivalence of correlation-based measures of non-Markovianity. **Physical Review A**, APS, v. 94, n. 3, p. 032105, 2016.
- 42 BREUER, H.-P.; LAINE, E.-M.; PIILO, J. Measure for the degree of non-Markovian behavior of quantum processes in open systems. **Physical Review Letters**, APS, v. 103, n. 21, p. 210401, 2009.
- 43 BUDINI, A. A. Quantum systems subject to the action of classical stochastic fields. **Physical Review A**, APS, v. 64, n. 5, p. 052110, 2001.
- 44 JAMES, D. F. Theory of heating of the quantum ground state of trapped ions. **Physical Review Letters**, APS, v. 81, n. 2, p. 317, 1998.
- 45 LAINE, E.-M.; PIILO, J.; BREUER, H.-P. Measure for the non-Markovianity of quantum processes. **Physical Review A**, APS, v. 81, n. 6, p. 062115, 2010.
- 46 HALL, M. J.; CRESSER, J. D.; LI, L.; ANDERSSON, E. Canonical form of master equations and characterization of non-Markovianity. **Physical Review A**, APS, v. 89, n. 4, p. 042120, 2014.

- 47 NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. **Quantum computation and quantum information**: 10th anniversary edition. 10th. ed. New York: Cambridge University Press, 2011.
- 48 WILDE, M. M. **Quantum information theory**. New York: Cambridge University Press, 2013.
- 49 WATROUS, J. **Theory of quantum information**. Cambridge: Cambridge University Press, 2011.
- 50 CHOI, M.-D. Completely positive linear maps on complex matrices. **Linear Algebra and its Applications**, Elsevier, v. 10, n. 3, p. 285–290, 1975.
- 51 BALLENTINE, L. E. **Quantum mechanics**: a modern development. 2nd. ed. Singapore: World Scientific, 2014.
- 52 HALL, M. J. W. Complete positivity for time-dependent qubit master equations. **Journal of Physics A**, v. 41, n. 20, p. 205302, 2008.
- 53 NAKAJIMA, S. On quantum theory of transport phenomena: steady diffusion. **Progress of Theoretical Physics**, Oxford University Press, v. 20, n. 6, p. 948–959, 1958.
- 54 ZWANZIG, R. Ensemble method in the theory of irreversibility. **Journal of Chemical Physics**, AIP, v. 33, n. 5, p. 1338–1341, 1960.
- 55 OLIVEIRA, T. W. **Termalização e correlações quânticas nos contextos de sistemas quânticos abertos e cadeias de spins. 2013. 224 p.** Tese (Doutorado) — Universidade Federal de São Carlos - UFSCar, São Carlos.
- 56 HAAKE, F. Statistical treatment of open systems by generalized master equations: *In*: HOHLER, G. (ed). **Springer tracts in modern physics**. Berlin: Springer, 1973. p. 98-168.
- 57 FAIN, B. **Irreversibilities in quantum mechanics**. Heidelberg: Springer, 2000. v. 113. (Fundamental theories of physics, v. 113).
- 58 COHEN-TANNOUJDI, C.; DUPONT-ROC, J.; GRYNBERG, G. **Atom-photon interactions**: basic processes and applications. Hoboken: Wiley-VCH, 1998. 678 p.
- 59 KRYSZEWSKI, S.; CZECHOWSKA-KRYSZK, J. **Master equation-tutorial approach**. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/0801.1757.pdf>. Acesso em: 23 jan. 2019.
- 60 CHICONE, C. **Ordinary differential equations with applications**. Berlin: Springer, 1999.
- 61 INCE, E. L. **Integration of ordinary differential equations**. Edimburgo: Oliver and Boyd, 1956.
- 62 DAVIES, E. B. Markovian master equations. **Communications in Mathematical Physics**, Springer, v. 39, n. 2, p. 91–110, 1974.
- 63 DAVIES, E. B. Markovian master equations II. **Mathematische Annalen**, Springer, v. 219, n. 2, p. 147–158, 1976.

-
- 64 GORINI, V.; KOSSAKOWSKI, A.; SUDARSHAN, E. C. G. Completely positive dynamical semigroups of N-level systems. **Journal of Mathematical Physics**, AIP, v. 17, n. 5, p. 821–825, 1976.
- 65 FRIGERIO, A.; GORINI, V. N-level systems in contact with a singular reservoir. ii. **Journal of Mathematical Physics**, AIP, v. 17, n. 12, p. 2123–2127, 1976.
- 66 FRIGERIO, A.; NOVELLONE, C.; VERRI, M. Master equation treatment of the singular reservoir limit. **Reports on Mathematical Physics**, v. 12, n. 2, p. 279–284, 1977.
- 67 ROSSMANN, W. **Lie groups**: an introduction through linear groups. New York: Oxford University Press, 2006. v. 5.
- 68 GARDINER, C.; ZOLLER, P.; ZOLLER, P. **Quantum noise**: a handbook of markovian and non-markovian quantum stochastic methods with applications to quantum optics. 3rd ed. ed. Berlin: Springer Science & Business Media, 2004. (Springer series in synenergetics, v.56).
- 69 BENATTI, F.; FLOREANINI, R. Open quantum dynamics: complete positivity and entanglement. **International Journal of Modern Physics B**, World Scientific, v. 19, n. 19, p. 3063–3139, 2005.
- 70 COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. **Quantum mechanics**. New York: Wiley, 1977.
- 71 LIDAR, D. A.; BIHARY, Z.; WHALEY, K. B. From completely positive maps to the quantum markovian semigroup master equation. **Chemical Physics**, Elsevier, v. 268, n. 1-3, p. 35–53, 2001.
- 72 ALBASH, T.; BOIXO, S.; LIDAR, D. A.; ZANARDI, P. Quantum adiabatic Markovian master equations. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 14, n. 12, p. 123016, 2012.
- 73 BUCHLEITNER, A.; VIVIESCAS, C.; TIERSCH, M. **Entanglement and decoherence**: foundations and modern trends. Berlin: Springer Science & Business Media, 2008.
- 74 ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J. **Mathematical methods for physicists**. San Diego, CA: Academic Press, 1999.
- 75 DIRAC, P. A. M. **The principles of quantum mechanics**. Oxford: Oxford University Press, 1981.
- 76 DOLL, R.; ZUECO, D.; WUBS, M.; KOHLER, S.; HÄNGGI, P. On the conundrum of deriving exact solutions from approximate master equations. **Chemical Physics**, Elsevier, v. 347, n. 1-3, p. 243–249, 2008.
- 77 WEISS, U. **Quantum dissipative systems**. Singapore: World scientific, 2012. (Series in modern condensed matter physics, v. 13).
- 78 KAMPEN, N. G. v. **Stochastic processes in physics and chemistry**. New York: North-Holland, 1981. 419 p.

- 79 COSTA-FILHO, J. I. **Quantum non-Markovianity induced by classical stochastic noise.** 2017. 184 p. 2017. Dissertação (Mestrado) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2017.
- 80 SUNDER, V. S. **Functional analysis: spectral theory.** New York: Springer Science & Business Media, 1997.
- 81 KATO, T. **A short introduction to perturbation theory for linear operators.** New York: Springer Science & Business Media, 2012.
- 82 FELLER, W. **An introduction to probability theory and its applications.** 3rd. ed. New York: Wiley New & Sons, 1967.
- 83 MOSS, F.; MCCLINTOCK, P. V. **Noise in nonlinear dynamical systems: theory of noise induced processes in special applications.** New York: Cambridge University Press, 1989.
- 84 BUDINI, A. A.; CHATTAH, A. K.; CÁCERES, M. O. On the quantum dissipative generator: weak-coupling approximation and stochastic approach. **Journal of Physics A: mathematical and general**, IOP Publishing, v. 32, n. 4, p. 631, 1999.
- 85 NOVIKOV, E. A. Functionals and the random-force method in turbulence theory. **Soviet Physics JETP**, v. 20, n. 5, p. 1290–1294, 1965.
- 86 MOUSSA, M.; MIZRAHI, S.; CALDEIRA, A. Quantum coherence in a dissipative-driven system and the optical stern-gerlach experiment. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 221, n. 3, p. 145–152, 1996.
- 87 NORRIS, J. R. **Markov chains.** New York: Cambridge University Press, 1998.
- 88 PARZEN, E. Stochastic processes. Society for industrial and applied mathematics. **Journal of Annals of Mathematical Statistics**, v. 65, n. 5, p. 1585–1591, 1999.
- 89 LÉVY, P. Exemples de processus pseudo-Markoviens. **Comptes Rendus Hebdomadaires des Seances L Academie des Sciences**, v. 228, n. 26, p. 2004–2006, 1949.
- 90 FELLER, W. et al. Non-Markovian processes with the semigroup property. **The Annals of Mathematical Statistics**, v. 30, n. 4, p. 1252–1253, 1959.
- 91 VACCHINI, B.; SMIRNE, A.; LAINE, E.-M.; PILO, J.; BREUER, H.-P. Markovianity and non-Markovianity in quantum and classical systems. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 13, n. 9, p. 093004, 2011.
- 92 WOLF, M. M.; CIRAC, J. I. Dividing quantum channels. **Communications in Mathematical Physics**, Springer, v. 279, n. 1, p. 147–168, 2008.
- 93 KOSSAKOWSKI, A. On quantum statistical mechanics of non-Hamiltonian systems. **Reports on Mathematical Physics**, Elsevier, v. 3, n. 4, p. 247–274, 1972.
- 94 LINDBLAD, G. On the generators of quantum dynamical semigroups. **Communications in Mathematical Physics**, Springer, v. 48, n. 2, p. 119–130, 1976.

-
- 95 WISSMANN, S.; BREUER, H.-P.; VACCHINI, B. Generalized trace-distance measure connecting quantum and classical non-Markovianity. **Physical Review A**, APS, v. 92, n. 4, p. 042108, 2015.
- 96 CHRUSCINSKI, D.; KOSSAKOWSKI, A.; RIVAS, Á. Measures of non-Markovianity: divisibility versus backflow of information. **Physical Review A**, APS, v. 83, n. 5, p. 052128, 2011.
- 97 CHRUSCINSKI, D.; WUDARSKI, F. A. Non-Markovian random unitary qubit dynamics. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 377, n. 21, p. 1425–1429, 2013.
- 98 CHRUSCINSKI, D.; MANISCALCO, S. Degree of non-Markovianity of quantum evolution. **Physical Review Letters**, APS, v. 112, n. 12, p. 120404, 2014.
- 99 LI, L.; HALL, M. J.; WISEMAN, H. M. Concepts of quantum non-Markovianity: a hierarchy. **Physics Reports**, Elsevier, v. 759, p. 1–51, 2018.
- 100 LORENZO, S.; PLASTINA, F.; PATERNOSTRO, M. Geometrical characterization of non-Markovianity. **Physical Review A**, APS, v. 88, n. 2, p. 020102, 2013.
- 101 BREUER, H.-P. Foundations and measures of quantum non-Markovianity. **Journal of Physics B**, IOP Publishing, v. 45, n. 15, p. 154001, 2012.
- 102 PINEDA, C.; GORIN, T.; DAVALOS, D.; WISNIACKI, D. A.; GARCÍA-MATA, I. Measuring and using non-Markovianity. **Physical Review A**, APS, v. 93, n. 2, p. 022117, 2016.
- 103 LU, X.-M.; WANG, X.; SUN, C. Quantum fisher information flow and non-Markovian processes of open systems. **Physical Review A**, APS, v. 82, n. 4, p. 042103, 2010.
- 104 ZENG, H.-S.; TANG, N.; ZHENG, Y.-P.; WANG, G.-Y. Equivalence of the measures of non-Markovianity for open two-level systems. **Physical Review A**, APS, v. 84, n. 3, p. 032118, 2011.
- 105 ZENG, H.-S.; TANG, N.; ZHENG, Y.-P.; XU, T.-T. Non-Markovian dynamics for an open two-level system without rotating wave approximation: indivisibility versus backflow of information. **The European Physical Journal D**, Springer, v. 66, n. 10, p. 255, 2012.
- 106 ADDIS, C.; HAIKKA, P.; MCENDOO, S.; MACCHIAVELLO, C.; MANISCALCO, S. Two-qubit non-Markovianity induced by a common environment. **Physical Review A**, APS, v. 87, n. 5, p. 052109, 2013.
- 107 ZHEN-YU, X.; SHI-QUN, Z. Quantum speed limit of a photon under non-Markovian dynamics. **Chinese Physics Letters**, IOP Publishing, v. 31, n. 2, p. 020301, 2014.
- 108 XU, Z.; LIU, C.; LUO, S.; ZHU, S. Anomalous non-Markovian effect in controllable open quantum systems. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/1310.1784.pdf>. Acesso em: 30 abr. 2019.
- 109 ADDIS, C.; BYLICKA, B.; CHRUSCINSKI, D.; MANISCALCO, S. **What we talk about when we talk about non-Markovianity**. 2014. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/1402.4975.pdf>. Acesso em: 23 jan. 2019.

- 110 APOLLARO, T. J.; FRANCO, C. D.; PLASTINA, F.; PATERNOSTRO, M. Memory-keeping effects and forgetfulness in the dynamics of a qubit coupled to a spin chain. **Physical Review A**, APS, v. 83, n. 3, p. 032103, 2011.
- 111 ZNIDARIC, M.; PINEDA, C.; GARCIA-MATA, I. Non-Markovian behavior of small and large complex quantum systems. **Physical Review Letters**, APS, v. 107, n. 8, p. 080404, 2011.
- 112 XU, Z.; YANG, W.; FENG, M. Proposed method for direct measurement of the non-Markovian character of the qubits coupled to bosonic reservoirs. **Physical Review A**, APS, v. 81, n. 4, p. 044105, 2010.
- 113 LI, J.-G.; ZOU, J.; SHAO, B. Non-Markovianity of the damped Jaynes-Cummings model with detuning. **Physical Review A**, APS, v. 81, n. 6, p. 062124, 2010.
- 114 LI J-G; ZOU, J. S. B. Entanglement evolution of two qubits under noisy environments. **Physical Review A**, APS, v. 82, n. 4, p. 042318, 2010.
- 115 HE, Z.; ZOU, J.; LI, L.; SHAO, B. Effective method of calculating the non-Markovianity η for single-channel open systems. **Physical Review A**, APS, v. 83, n. 1, p. 012108, 2011.
- 116 HAIKKA, P.; MCENDOO, S.; CHIARA, G. D.; PALMA, G.; MANISCALCO, S. Quantifying, characterizing, and controlling information flow in ultracold atomic gases. **Physical Review A**, APS, v. 84, n. 3, p. 031602, 2011.
- 117 XIAO, X.; FANG, M.-F.; LI, Y.-L. Non-Markovian dynamics of a three-level λ -atom coupled to a structured reservoir: comparison between the weak and strong coupling regimes. **Physica Scripta**, IOP Publishing, v. 83, n. 1, p. 015013, 2011.
- 118 LAINE, E.-M.; BREUER, H.-P.; PILO, J.; LI, C.-F.; GUO, G.-C. Nonlocal memory effects in the dynamics of open quantum systems. **Physical Review Letters**, APS, v. 108, n. 21, p. 210402, 2012.
- 119 GU, W.-j.; LI, G.-x. Non-Markovian behavior for spontaneous decay of a v-type three-level atom with quantum interference. **Physical Review A**, APS, v. 85, n. 1, p. 014101, 2012.
- 120 XIAO-LI, H.; HOU, S.-C.; WANG, L.-C.; YI, X.-X. Non-Markovianity and initial correlations for the generalized Lindblad master equation. **Open Physics**, Versita, v. 10, n. 4, p. 947–952, 2012.
- 121 MANNONE, M.; FRANCO, R. L.; COMPAGNO, G. Comparison of non-Markovianity criteria in a qubit system under random external fields. **Physica Scripta**, IOP Publishing, v. 2013, n. T153, p. 014047, 2013.
- 122 LORENZO, S.; PLASTINA, F.; PATERNOSTRO, M. Geometrical characterization of non-Markovianity. **Physical Review A**, APS, v. 88, n. 2, p. 020102, 2013.
- 123 APOLLARO, T. J.; LORENZO, S.; FRANCO, C. D.; PLASTINA, F.; PATERNOSTRO, M. Competition between memory-keeping and memory-erasing decoherence channels. **Physical Review A**, APS, v. 90, n. 1, p. 012310, 2014.

-
- 124 PLASTINA, F.; SINDONA, A.; GOOLD, J.; GULLO, N. L.; LORENZO, S. Decoherence in a fermion environment: non-Markovianity and orthogonality catastrophe. **Open Systems & Information Dynamics**, World Scientific, v. 20, n. 03, p. 1340005, 2013.
- 125 TUFARELLI, T.; KIM, M.; CICCARELLO, F. Non-Markovianity of a quantum emitter in front of a mirror. **Physical Review A**, APS, v. 90, n. 1, p. 012113, 2014.
- 126 BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C.; MEADE, D. B. **Elementary differential equations**. New York: John Wiley & Sons, 2017.
- 127 BENEDETTI, C.; BUSCEMI, F.; BORDONE, P.; PARIS, M. G. Dynamics of quantum correlations in colored-noise environments. **Physical Review A**, APS, v. 87, n. 5, p. 052328, 2013.
- 128 GAWRON, P.; KURZYK, D.; PAWELA, Ł. Decoherence effects in the quantum qubit flip game using markovian approximation. **Quantum Information Processing**, Springer, v. 13, n. 3, p. 665–682, 2014.
- 129 PRESKILL, J. **Lecture notes for Ph219/CS219: quantum information and computation**. 2001.
- 130 IWAKURA, A.; MATSUZAKI, Y.; KONDO, Y. Engineered noisy environment for studying decoherence. **Physical Review A**, APS, v. 96, n. 3, p. 032303, 2017.
- 131 KONDO, Y.; MATSUZAKI, Y.; MATSUSHIMA, K.; FILGUEIRAS, J. G. Using the quantum zeno effect for suppression of decoherence. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 18, n. 1, p. 013033, 2016.
- 132 KONDO, Y.; NAKAHARA, M.; TANIMURA, S.; KITAJIMA, S.; UCHIYAMA, C.; SHIBATA, F. Generation and suppression of decoherence in artificial environment for qubit system. **Journal of the Physical Society of Japan**, The Physical Society of Japan, v. 76, n. 7, p. 074002, 2007.
- 133 SLICHTER, C. P. **Principles of magnetic resonance**. Berlin: Springer, 2013. (Springer series in solid-state sciences, v. 1).
- 134 REED, M.; SIMON, B. **Methods of modern mathematical physics I**. San Diego: Academic Press, 1980.
- 135 REED M.; SIMON, B. **Methods of modern mathematical physics II**. San Diego: Academic Press, 1980.
- 136 VLADIMIROV, V. S. **Methods of the theory of generalized functions**. New York: CRC Press, 2002.

Apêndices

APÊNDICE A – MÉTODO DA VARIAÇÃO DOS PARÂMETROS

O método da variação dos parâmetros ou método de Lagrange (60, 61) permite encontrar uma solução geral de uma equação diferencial não homogênea. Seja a equação diferencial da forma

$$\frac{d}{dx}y(x) = \alpha(x)y(x) + \beta(x). \quad (\text{A.1})$$

A solução geral da Eq. (A.1) é composta pela soma do termo denominado homogêneo, quando $\beta(x) = 0$, e outro termo denominado particular, quando $\beta(x) \neq 0$. Abaixo temos ambos os termos mais detalhados

1. **Solução homogênea:** Como $\beta(x) = 0$, a solução é facilmente obtida simplesmente integrando ambos os lados da equação diferencial, onde assumimos por simplicidade que $x_0 = 0$

$$\frac{dy(x)}{dx} = \alpha(x)y(x) = 0 \Rightarrow y_h(x) = y(0) e^{-\int_0^x \alpha(x') dx'} \quad (\text{A.2})$$

2. **Solução particular:** A solução particular é obtida assumindo o *ansatz* $y_p(x) = z(x)e^{-f(x)}$, onde $f(x) = \int_0^x \alpha(x') dx'$. Substituindo o *ansatz* na Eq. (A.1), temos

$$\frac{dz(x)}{dx} = \beta(x) e^{f(x)} \Rightarrow z(x) = \int_0^x \beta(x') dx', \quad (\text{A.3})$$

em que foi considerado a condição inicial $z(0) = 0$. A solução particular $y_p(x)$ se torna então

$$y_p(x) e^{f(x)} = \int_0^x \beta(x') e^{f(x')} dx'. \quad (\text{A.4})$$

Isolando o termo de interesse, $y_p(x)$, obtemos

$$\begin{aligned} y_p(x) &= \int_0^x \beta(x') e^{-[f(x)-f(x')]} dx' \\ &= \int_0^x \beta(x') \mathcal{G}(x, x') dx', \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

em que o propagador é definido como $\mathcal{G}(x, x') = e^{-[f(x)-f(x)]}$.

3. **Solução geral:** A solução geral da equação diferencial é determinada através da soma da solução homogênea e particular, $y(x) = y_h(x) + y_p(x)$

$$\begin{aligned} y(x) &= y(0) e^{-\int_0^x \alpha(x') dx'} + \int_0^x \mathcal{G}(x, x') \beta(x') dx' \\ &= y(0) \mathcal{G}(x, 0) + \int_0^x \mathcal{G}(x, x') \beta(x') dx' \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

APÊNDICE B – POSITIVIDADE DA MATRIZ DECOERÊNCIA

Neste apêndice será demonstrado que as matrizes $\gamma_{\alpha\beta}(\omega)$ são positivas semidefinidas, gerando que a equação mestra presente na Eq. (3.139) obedeça a forma de Lindblad. (3) Usando a Eq. (3.125), podemos escrever explicitamente a matriz

$$\gamma_{\alpha\beta}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{i\omega u} \text{Tr}_R [\tilde{B}_\alpha(u) B_\beta(0) \rho_R]. \quad (\text{B.1})$$

Uma matrix complexa M_c é dita ser positiva semidefinida se $v^\dagger M_c v \geq 0$, para todo vetor v . (81) De acordo com o teorema de Bochner (134, 135), a transformada de Fourier de uma função $f(t)$ de tipo positivo (positive type) é positiva, em outras palavras, $f(t)$ é dita ser positiva se para cada t_i e t_j a matriz $f_{ij} = f(t_i - t_j)$ é positiva semidefinida. Calculando $v^\dagger \gamma(\omega) v$

$$\begin{aligned} v^\dagger \gamma(\omega) v &= \sum_{\alpha, \beta} v_\alpha^* \gamma_{\alpha\beta}(\omega) v_\beta \\ &= v_\alpha^* \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{i\omega u} \text{Tr}_R [\tilde{B}_\alpha(u) B_\beta(0) \rho_R] v_\beta \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{i\omega u} \text{Tr}_R \left[\sum_{\alpha, \beta} v_\alpha^* e^{iH_R u} B_\alpha e^{-iH_R u} B_\beta(0) \rho_R v_\beta \right] \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{i\omega u} \text{Tr}_R \left[e^{iH_R u} \left(\sum_\alpha v_\alpha^* B_\alpha \right) e^{-iH_R u} \left(\sum_\beta B_\beta(0) \right) \rho_R \right] \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{i\omega u} \text{Tr}_R \left(e^{iH_R u} C^\dagger e^{-iH_R u} C \rho_R \right), \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

sendo $C = \sum_\alpha B_\alpha v_\alpha$ e podemos definir $f(t) = \text{Tr}_R [e^{iH_R t} C^\dagger e^{-iH_R t} C \rho_R]$. Assumindo que o operador do reservatório ρ_R é um estado térmico e usando $\{|n_E\rangle\}$ como uma base do Hamiltoniano H_R , obtemos

$$\rho_R |n_E\rangle = \frac{e^{-\beta E}}{\text{Tr}(e^{-\beta H_R})} |n_E\rangle \equiv p_E |n_E\rangle, \quad (\text{B.3})$$

em que $\beta = 1/T$ e $p_E \geq 0$. Escrevendo a função $f(t)$ explicitamente, lembrando que o espectro do reservatório foi considerado contínuo e a propriedade de identidade $\mathbf{1} = \int dE' |n_{E'}\rangle \langle n_{E'}|$ (assim temos que o traço é escrito em forma de uma integral ao invés de

uma somatória)

$$\begin{aligned}
f(t) &= \int dE \langle n_E | e^{iH_R t} C^\dagger e^{-iH_R t} C \rho_R | n_E \rangle \\
&= \int dE e^{iEt} p_E \langle n_E | C^\dagger e^{-iH_R t} C | n_E \rangle \\
&= \int dE e^{iEt} p_E \langle n_E | C^\dagger e^{-iH_R t} \left(\int dE' | n_{E'} \rangle \langle n_{E'} | \right) C | n_E \rangle \\
&= \int dE dE' e^{iEt} p_E \langle n_E | C^\dagger e^{-iH_R t} | n_{E'} \rangle \langle n_{E'} | C | n_E \rangle \\
&= \int dE dE' e^{i(E-E')t} p_E |\langle n_{E'} | C | n_E \rangle|^2.
\end{aligned} \tag{B.4}$$

Assim a matriz f_{ij} é positiva semidefinida para qualquer vetor arbitrário w

$$\begin{aligned}
\sum_{i,j} w_i^* f(t_i - t_j) w_j &= \int dE dE' \sum_{i,j} w_i^* e^{i(E-E')(t_i - t_j)} w_j p_E |\langle n_{E'} | C | n_E \rangle|^2 \\
&= \int dE dE' \sum_i w_i^* e^{i(E-E')t_i} \sum_j w_j e^{-i(E-E')t_j} p_E |\langle n_{E'} | C | n_E \rangle|^2 \\
&= \int dE dE' \left| \sum_i w_i^* e^{i(E-E')t_i} \right|^2 p_E |\langle n_{E'} | C | n_E \rangle|^2 \geq 0,
\end{aligned} \tag{B.5}$$

implicando pelo teorema de Bochner que a matrix $\gamma(\omega) \geq 0$.

APÊNDICE C – O HAMILTONIANO DE *LAMB-SHIFT*

Neste apêndice faremos a demonstração da correlação $S_{\alpha\beta}(\omega_0)$, presente na Eq. (3.189) e apresentada logo abaixo, necessária para o cálculo do Hamiltoniano de *Lamb-Shift*

$$\begin{aligned} S_{\alpha\beta}(\omega_0) &= \text{P.V.} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\text{Tr} [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R]}{\omega_0 - \omega'} \\ &= \text{P.V.} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\langle B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rangle}{\omega_0 - \omega'}. \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

Para evitar que o leitor volte as páginas do Cap. 3, vamos relembrar todos os termos necessários para a completa compreensão da demonstração. Assim, relembrando as relações

$$\gamma_{\alpha\beta}(\omega) = \Gamma_{\alpha\beta}^\infty(\omega) + \Gamma_{\alpha\beta}^{\infty*}(\omega), \quad (\text{C.2})$$

$$S_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{2i} [\Gamma_{\alpha\beta}^\infty(\omega) - \Gamma_{\alpha\beta}^{\infty*}(\omega)], \quad (\text{C.3})$$

podemos escrever o termo $S_{\alpha,\beta}(\omega_0)$

$$S_{\alpha\beta}(\omega_0) = -i\Gamma_{\alpha\beta}^\infty(\omega_0) + \frac{i}{2}\gamma_{\alpha\beta}(\omega_0), \quad (\text{C.4})$$

em que

$$\Gamma_{\alpha\beta}^\infty(\omega_0) = \int_0^{+\infty} du e^{i\omega_0 u} \text{Tr}_R [\tilde{B}_\alpha(u) B_\beta(0) \rho_R] \quad (\text{C.5})$$

$$\gamma_{\alpha\beta}(\omega_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{i\omega_0 u} \text{Tr}_R [\tilde{B}_\alpha(u) B_\beta(0) \rho_R]. \quad (\text{C.6})$$

Procedendo com a Eq. (C.6), temos

$$\begin{aligned} \gamma_{\alpha\beta}(\omega_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{i\omega_0 u} \text{Tr}_R [\tilde{B}_\alpha(u) B_\beta(0) \rho_R] \\ &= \int_0^{+\infty} d\omega' \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{i(\omega_0 - \omega')u} \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R] \\ &= 2\pi \int_0^{+\infty} d\omega' \delta(\omega_0 - \omega') \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R] \\ &= 2\pi \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega_0) B_\beta(0) \rho_R], \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

na qual foi utilizado a representação da função delta (74)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} du e^{i(\omega_0 - \omega')u} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{2\epsilon}{(\omega_0 - \omega')^2 + \epsilon^2} \equiv 2\pi \delta(\omega_0 - \omega'). \quad (\text{C.8})$$

Dando prosseguimento, reescrevendo a Eq. (C.4) utilizando os resultados das Eqs. (C.5) e (C.7), temos

$$S_{\alpha\beta}(\omega_0) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \int_0^{+\infty} du e^{i(\omega_0 - \omega')u} \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R] + i\pi \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega_0) B_\beta(0) \rho_R]. \quad (\text{C.9})$$

Como a integral $\int_0^{+\infty} du e^{i(\omega_0 - \omega')u}$ não é bem definida, podemos aplicar o seguinte truque para contornar tal problema

$$\int_0^{+\infty} du e^{i(\omega_0 - \omega')u} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_0^{+\infty} du e^{i(\omega_0 - \omega' + i\epsilon)u} = i \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\omega_0 - \omega' + i\epsilon}. \quad (\text{C.10})$$

Assim, a Eq. (C.9) se torna

$$S_{\alpha\beta}(\omega_0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\text{Tr}_R [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R]}{\omega_0 - \omega' + i\epsilon} + i\pi \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega_0) B_\beta(0) \rho_R]. \quad (\text{C.11})$$

Multiplicando e dividindo o primeiro termo pelo complexo conjugado do denominador

$$\begin{aligned} S_{\alpha\beta}(\omega_0) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\text{Tr}_R [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R]}{(\omega_0 - \omega' + i\epsilon)} \left(\frac{\omega_0 - \omega' - i\epsilon}{\omega_0 - \omega' - i\epsilon} \right) + i\pi \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega_0) B_\beta(0) \rho_R] \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{(\omega_0 - \omega') \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R]}{(\omega_0 - \omega')^2 + \epsilon^2} \\ &\quad - i \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \left[\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{\epsilon}{(\omega_0 - \omega')^2 + \epsilon^2} \right] \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R] \\ &\quad + i\pi \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega_0) B_\beta(0) \rho_R]. \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

Usando a representação da função delta, presente na Eq. (C.8)

$$\begin{aligned} S_{\alpha\beta}(\omega_0) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{(\omega_0 - \omega') \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R]}{(\omega_0 - \omega')^2 + \epsilon^2} \\ &\quad - i\pi \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \delta(\omega_0 - \omega') \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R] + i\pi \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega_0) B_\beta(0) \rho_R] \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{(\omega_0 - \omega') \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R]}{(\omega_0 - \omega')^2 + \epsilon^2}. \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

Usando a definição do valor principal de Cauchy (74) (do inglês *Cauchy principal value*)

$$\text{P.V.} \int_a^c f(x) dx = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left[\int_a^{b-\delta} f(x) dx + \int_{b+\delta}^c f(x) dx \right], \quad (\text{C.14})$$

e decompondo os limites de integração em três intervalos definidos abaixo

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' (\dots) \rightarrow \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\omega-\delta} d\omega' (\dots) + \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{\omega-\delta}^{\omega+\delta} d\omega' (\dots) + \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{\omega+\delta}^{+\infty} d\omega' (\dots). \quad (\text{C.15})$$

Como $\delta \rightarrow 0$ o segundo termo da Eq. (C.15) vai para zero. Assim, a Eq. (C.13) se torna

$$\begin{aligned} S_{\alpha\beta}(\omega_0) &= \lim_{\epsilon, \delta \rightarrow 0^+} \left[\int_{-\infty}^{\omega-\delta} d\omega' \frac{(\omega_0 - \omega') \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R]}{(\omega_0 - \omega')^2 + \epsilon^2} \right. \\ &\quad \left. + \int_{\omega+\delta}^{+\infty} d\omega' \frac{(\omega_0 - \omega') \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R]}{(\omega_0 - \omega')^2 + \epsilon^2} \right] \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left[\int_{-\infty}^{\omega-\delta} d\omega' \frac{\text{Tr}_R [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R]}{\omega_0 - \omega'} + \int_{\omega+\delta}^{+\infty} d\omega' \frac{\text{Tr}_R [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R]}{\omega_0 - \omega'} \right], \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

que é a própria definição do valor principal de Cauchy, presente na Eq. (C.14). Desta maneira, chegamos finalmente no resultado desejado

$$S_{\alpha\beta}(\omega_0) = \text{P.V.} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\text{Tr}_R [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R]}{\omega_0 - \omega'}. \quad (\text{C.17})$$

Outra maneira mais direta de obtermos o mesmo resultado da Eq. (C.17) é usando a fórmula de Sokhotsky (136)

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\epsilon} = \mp i\pi\delta(x) + \text{P.V.} \left(\frac{1}{x} \right). \quad (\text{C.18})$$

Aplicando a fórmula na Eq. (C.11), temos

$$\begin{aligned} S_{\alpha\beta}(\omega_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R] \left[-i\pi\delta(\omega_0 - \omega') + \text{P.V.} \left(\frac{1}{\omega_0 - \omega'} \right) \right] \\ &\quad + i\pi \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega_0) B_\beta(0) \rho_R] \\ &= -i\pi \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega_0) B_\beta(0) \rho_R] + \text{P.V.} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\text{Tr}_R [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R]}{\omega_0 - \omega'} \\ &\quad + i\pi \text{Tr}_R [B_\alpha(\omega_0) B_\beta(0) \rho_R], \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

resultando na equação desejada

$$S_{\alpha\beta}(\omega_0) = \text{P.V.} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\text{Tr}_R [B_\alpha(\omega') B_\beta(0) \rho_R]}{\omega_0 - \omega'} \quad (\text{C.20})$$

APÊNDICE D – O REFERENCIAL DUPLO GIRANTE

Neste apêndice iremos mostrar como o referencial duplo girante se conecta com o Hamiltoniano de dois q-bits (spins). Suponha que o Hamiltoniano total sob o efeito de um campo magnético estático B_0 , possa ser escrito da seguinte maneira (15, 132)

$$H = \omega_1 \sigma_1^z \otimes \mathbf{1} + \omega_2 \mathbf{1} \otimes \sigma_2^z + J \sigma_1^z \otimes \sigma_2^z, \quad (\text{D.1})$$

em que J é a constante de acoplamento escalar, $\omega_k = -\gamma_k B_0$ e γ_k é o fator giromagnético do núcleo k . Usando a equação de Schrödinger

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle, \quad (\text{D.2})$$

em que usamos $\hbar = 1$. Usando a transformação unitária

$$R(t) = e^{i\omega_1 \sigma_1^z t} \otimes e^{i\omega_2 \sigma_2^z t}, \quad (\text{D.3})$$

tal que a função de onda se transforma segundo a aplicação de $R(t)$

$$|\psi'(t)\rangle = R(t) |\psi(t)\rangle \Leftrightarrow |\psi(t)\rangle = R^\dagger(t) |\psi'(t)\rangle. \quad (\text{D.4})$$

Aplicando a derivada temporal na equação acima, temos

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} |\psi'(t)\rangle &= i \frac{dR(t)}{dt} |\psi(t)\rangle + i R(t) \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \\ &= i \frac{dR(t)}{dt} |\psi(t)\rangle + R(t) H |\psi(t)\rangle \\ &= \left[i \frac{dR(t)}{dt} R^\dagger(t) + R(t) H R^\dagger(t) \right] |\psi'(t)\rangle \\ &= H' |\psi'(t)\rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

Assim, o estado $|\psi'(t)\rangle$ satisfaz a equação de Schrödinger. Escrevendo o Hamiltoniano H explicitamente

$$H = \begin{pmatrix} J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -J & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J \end{pmatrix}, \quad (\text{D.6})$$

e o Hamiltoniano transformado H'

$$H' = \begin{pmatrix} J - \Delta\omega & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -J + \Delta\omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -J - \Delta\omega & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J + \Delta\omega \end{pmatrix}, \quad (\text{D.7})$$

sendo $\Delta\omega = \omega_1 - \omega_2$. Comparando as Eqs. (D.6) e (D.7), vemos que elas diferem apenas pelo fator $\Delta\omega$. Escolhendo um referencial que gira com uma velocidade angular $\Delta\omega$, o Hamiltoniano H' simplesmente se torna H . Então a transformação $R(t)$ faz uma troca de um referencial do laboratório para um referencial girante. (132)