UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

TIAGO BARBIN BATALHÃO

Tratamento algébrico e computacionalmente
eficiente para a interação entre sistema
e meio ambiente

São Carlos

2012

TIAGO BARBIN BATALHÃO

Tratamento algébrico e computacionalmente
eficiente para a interação entre sistema e
meio ambiente

Dissertação 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 Mestre em
Ciências.

Área de concentração: Física Básica
Orientador: Prof. Dr. Miled Hassan Youssef
Moussa

Versão corrigida

(versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

São Carlos

2012

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.

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Biblioteca e Informação do IFSC,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Batalhão, Tiago Barbin

Tratamento algébrico e computacionalmente eficiente para a interação entre sistema e meio ambiente / Tiago Barbin Batalhão; orientador Miled Hassan Youssef Moussa - versão corrigida -- São Carlos, 2012.
115 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em Física Básica) -- Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2012.

1. Dissipação quântica. 2. Decoerência. 3. Equações mestras quânticas. 4. Redes de osciladores dissipativos. I. Moussa, Miled Hassan Youssef, orient. II. Título.

DEDICO A MINHA MÃE,
MARIA AMÉLIA BARBIN BATALHÃO
E A MEU PAI,
CARLOS HENRIQUE BATALHÃO.

AGRADECIMENTOS

Meus primeiros agradecimentos não poderiam ir para outros a não ser os meus pais, a quem dedico essa dissertação. Reconheço toda o carinho, a dedicação e esforço que eles sempre demonstraram para garantir uma vida feliz e confortável aos seus filhos, tanto enquanto ainda morava com eles quanto nos últimos seis anos em que estou em São Carlos. Agradeço também o suporte familiar que sempre tive por parte de avós e tios, de quem aprendi muito, e de irmão e primos.

Gostaria de fazer um agradecimento especial a meu orientador, Miled Moussa, por quem fui apresentado a muitos temas interessantes, que me motivaram em diferentes momentos de meu mestrado, e com quem considero que desenvolvi uma relação de amizade além da relação de orientador-aluno, que me valeu bons conselhos em momentos de que deles precisei.

Agradeço aos inúmeros professores que conheci durante todo esse período de graduação e mestrado, pelas boas aulas que ministraram e pela ótima relação que mantive com eles fora da sala de aula, e que espero que continue por um longo tempo.

Agradeço também aos professores que tive antes da universidade, no Instituto Santa Úrsula de Ribeirão Preto, em especial ao professor Sérgio, que me estimulou e me preparou para participar de Olimpíadas de Física, o que posso dizer que foi o principal motivo que me levou à decisão de cursar Física e optar pelo excelente Instituto de Física de São Carlos.

Agradeço ainda ao apoio financeiro de Capes e Fapesp, de quem fui bolsista durante a escrita dessa dissertação.

No campo pessoal, sou grato por ter tido várias amizades durante diversos períodos de minha vida, incluindo muitos de quem perdi o contato mas ainda guardo boas lembranças. Alguns deles, no entanto, estiveram a meu lado durante vários anos já, e sei que continuaremos juntos ainda por muito mais. Amigos que me foram importantes, desejo-lhes um profundo agradecimento. Cito aqui Rodrigo Veiga, Felipe Penha, Luciano Falqueto, Cora Castelo Branco, Anderson Oliveira, Itauã Bergoc, e me desculpo se esqueci de alguém que pertença a essa lista.

Estendo esse agradecimento àqueles amigos mais recentes, como Cinthia Brigante, Gentil Neto, Paulo Moryia, Camillo Valencia, e Wilson Mercado. Apesar de nos conhecermos há no máximo dois anos, vocês foram importantes nesse período, cada um à sua maneira.

Por fim, um agradecimento a uma pessoa que entrou em minha vida há pouco mais de um ano e tem sido especial desde então, Laís Serrão. Agradeço a ela por todos os momentos que passamos juntos, por todos os momentos em que ela me apoiou na busca de meus desejos e sonhos, e pelos momentos em que tive a oportunidade de retribuir. Desejo a ela um excelente futuro, com muita felicidade, assim como sei que ela deseja o mesmo para mim.

Este trabalho foi financiado pela
CAPES e FAPESP

Resumo

BATALHÃO, T. B. Tratamento algébrico e computacionalmente eficiente para a interação entre sistema e meio ambiente. 2012. 113 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

Realizamos nesse trabalho um tratamento abrangente da interação entre um sistema quântico e o meio ambiente modelado como um conjunto de osciladores harmônicos. Partimos para isso de um tratamento prévio de redes de osciladores harmônicos quânticos dissipativos. Utilizando a função característica, transformamos a equação de von Neumann em uma equação diferencial, e explorando a sua linearidade, essa é transformada em uma equação vetorial, cuja resolução é computacionalmente eficiente. Nosso formalismo, que parte de uma rede de osciladores harmônicos, não necessariamente dividida entre sistema e meio ambiente, permite que se contorne a necessidade da hipótese de acoplamento súbito sistema-reservatório para o tratamento exato da evolução do sistema. Em seguida, mostramos que essa evolução pode ser sempre descrita por uma equação mestra na forma usual de Lindblad, embora os coeficientes que a definem possam ser dependentes do tempo. Isso abre novas possibilidades para a dinâmica do sistema, e leva a efeitos que podem ser classificados de não-Markovianos, embora sejam descritos por uma equação mestra completamente local no tempo. Ressaltamos que, por ser baseado em uma solução exata, o método pode ser aplicado para qualquer intensidade de acoplamento, e é consideravelmente mais simples do que outros métodos disponíveis para esse fim, como os baseados em integrais de trajetória. Por fim, utilizamos simulações computacionais para explorar a validade das aproximações de ondas girantes e de Born-Markov, e os fenômenos que podem ser observados nos regimes em que elas deixam de ser válidas.

Palavras-chave: Dissipação quântica. Decoerência. Equações mestras quânticas. Redes de osciladores dissipativos.

Abstract

BATALHÃO, T. B. Algebraic and computationally efficient treatment for the system-environment interaction. 2012. 113 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

We present a comprehensive treatment of the interaction of a quantum system with an environment modeled as a set of harmonic oscillators. We start from a previous treatment of a network of quantum dissipative harmonic oscillators. Using the characteristic function, we transform the von Neumann equation in a differential equation, and exploring its linearity, this is transformed in a vector equation, whose solution is computationally efficient. Our method, whose origin lies on a network not necessarily divided into system and reservoir, allows us to circumvent the necessity of the sudden-coupling approximation for the exact treatment of the system evolution. After this, we show that this dynamics can always be described by a master equation in standard Lindblad form, although its coefficients may be functions of time. This opens new possibilities for the system dynamics, and lead to effects that may be called non-Markovian, even if they are described by a completely local-in-time master equation. It should be emphasized that, as it is based on an exact solution, the method may be applied for any strength of the system-reservoir interaction, and it is considerably simpler than other available methods, such as those based on path integrals. Finally, we employ computer simulations to investigate the validity of the rotating-wave and Born-Markov approximations, and the phenomena that might be observed in regimes in which they fail to be valid.

Keywords: Quantum Dissipation. Decoherence. Quantum master equations. Networks of dissipative oscillators.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Topologia de uma rede de osciladores completamente interagentes, correspondente ao Hamiltoniano 2.1. Figura extraída de, ¹ com permissão do autor.	28
Figura 3.1 – Topologia de uma rede de osciladores na configuração central, ou estrela, correspondente ao Hamiltoniano 3.1. Figura extraída de, ¹ com permissão do autor.	60
Figura 4.1 – Elementos de matriz de S e S_{OG} , representando o decaimento das quadraturas. Em linha cheia, os elementos $S_{2,2}$ e $S_{2,1}$, representando um estado inicial deslocado na quadratura de momento. Em linha tracejada, os elementos $S_{1,1}$ e $-S_{1,2}$, representando um estado inicial deslocado na quadratura de posição. Em linha pontilhada, o quadratura inicial e a quadratura ortogonal na aproximação de ondas girantes	70
Figura 4.2 – Elementos diagonais de S e S_{OG} , em escala logarítmica. Similar à figura 4.1	70
Figura 4.3 – Espectro de Fourier dos elementos diagonais de S e S_{OG} , com ajuste Lorentziano. A largura de cada ajuste é indicada.	71
Figura 4.4 – Taxa de decaimento variável no tempo. A taxa varia de forma linear em tempos curtos, mas atinge um valor constante, e consistente com os ajustes mostrados nas figuras 4.2 e 4.3.	72
Figura 4.5 – Detalhe da evolução das quadraturas em tempos curtos.	72
Figura 4.6 – Evolução da quadratura inicial no referencial girante, com a aproximação de ondas girantes, para diferentes formas de ruído. No inset, as densidades espectrais de acordo com a equação 3.13 . . .	73
Figura 4.7 – Parâmetros P e Q do mapa de evolução para um reservatório térmico a temperatura alta	74

Figura 4.8 – Parâmetros P e Q do mapa de evolução para um reservatório térmico a temperatura zero	74
Figura 4.9 – Evolução da energia média do oscilador para um estado inicial com $ \alpha = 7$	75
Figura 4.10 – Evolução da pureza de um estado inicial coerente, para diferentes intensidades de acoplamento	75
Figura 4.11 – Evolução da energia média para reservatórios Lorentzianos a temperatura zero. As curvas pontilhadas apresentam comportamento Markoviano, enquanto a curva cheia apresenta um comportamento não-Markoviano	77
Figura 4.12 – Evolução da energia média para reservatórios Lorentzianos a temperatura zero, na aproximação de ondas girantes. As curvas pontilhadas apresentam comportamento Markoviano, enquanto a curva cheia apresenta um comportamento não-Markoviano	78
Figura 4.13 – Evolução de uma quadratura para reservatórios Lorentzianos, na aproximação de ondas girantes. As curvas pontilhadas apresentam comportamento Markoviano, enquanto a curva cheia apresenta um comportamento não-Markoviano	80
Figura 4.14 – Evolução do parâmetro $\gamma_1(t)$ da equação mestra, que corresponde a uma taxa de decaimento. Para reservatórios não Markovianos, ele pode assumir um valor negativo	80

SUMÁRIO

1	Introdução	21
2	Tratamento algébrico da interação sistema-reservatório	25
2.1	Dinâmica unitária linear	26
2.1.1	Ondas girantes e a aproximação de James	30
2.1.2	Equações de Heisenberg	32
2.1.3	Representação de estados coerentes	33
2.1.4	Função característica	36
2.1.5	Transformação simplética	39
2.1.6	Mapa Gaussiano	41
2.2	Dinâmica reduzida	42
2.2.1	Traço parcial e função característica	43
2.2.2	Mapa Gaussiano	46
2.2.3	Fidelidade da evolução	47
2.3	Dinâmica não-unitária	48
2.3.1	Dinâmica de um modo	50

2.3.2	Equação de Fokker-Planck e Langevin	52
2.4	Variáveis discretas	54
3	O limite do reservatório contínuo	59
3.1	Dinâmica de um modo	59
3.1.1	Acoplamento de coordenadas	60
3.1.2	Aproximação de ondas girantes	63
3.2	Limite do contínuo	64
4	Simulação eficiente de um reservatório estruturado	67
4.1	Grandezas relevantes	67
4.2	Acoplamento fraco	68
4.2.1	Quadraturas	69
4.2.2	Forma espectral do ruído	72
4.2.3	Termalização	73
4.3	Comportamento não-Markoviano	75
4.3.1	Equação mestra	78
5	Conclusões e perspectivas	81
	REFERÊNCIAS	83
	APÊNDICES	88
A	Mecânica Quântica no espaço de fase	91
A.1	Funções de quasi-probabilidade	91
A.1.1	Regras de ordenamento	92
A.1.2	Funções P de Glauber-Sudarshan e Q de Husimi	93

A.2	Função característica simétrica	94
B	Equação Mestra (derivação microscópica)	97
B.1	Forma de Lindblad	102
C	Dinâmica efetiva de James	105
C.1	Hamiltoniano efetivo	105
C.2	Equação mestra efetiva	108
D	Estrutura simplética	113

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

O problema da dissipação em Mecânica Quântica remonta ao trabalho de Weisskopf e Wigner,² de 1930, em que se calcula a largura natural de linha (espectros de transições atômicas) através da teoria quântica da radiação. A partir deste trabalho, diversas contribuições foram apresentadas no intuito de formalizar o tratamento de sistemas quânticos abertos,³⁻⁶ mas apenas com o trabalho de Senitzky,⁷ de 1960, é que se considera explicitamente a interação entre o sistema de interesse com um reservatório térmico quântico. Senitzky estava particularmente interessado, no âmbito da Óptica Quântica, no problema da dissipação de um modo da cavidade com fator de qualidade finito.

No contexto da Física de Estado Sólido, mais especificamente no estudo do comportamento de junções Josephson a baixas temperaturas, Koch e colaboradores⁸ apresentam um tratamento pelo qual procura-se preservar no âmbito da Mecânica Quântica, a equação de Langevin, utilizada para a descrição do movimento de uma partícula clássica de massa m em um meio viscoso à temperatura T e constante de amortecimento η . O procedimento adotado por Koch e colaboradores consiste em substituir a correlação temporal entre as forças estocásticas clássicas que atuam sobre a partícula, descrita pela relação

$$\langle F(t_1) F(t_2) \rangle = 2\eta k_B T \delta(t_1 - t_2) \ , \quad (1.1)$$

que representa uma média estatística em um ensemble de sistemas preparados de forma

idêntica, pela sua contrapartida quântica

$$\langle F(t_1) F(t_2) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^\Omega e^{-i\omega(t_1-t_2)} \eta \hbar \omega \coth\left(\frac{\hbar \omega}{2k_B T}\right) d\omega, \quad (1.2)$$

em que k_B indica a constante de Boltzmann e Ω uma frequência de corte, adequadamente escolhida. Evidentemente, para intervalos de tempo de interesse, nos quais $|t_1 - t_2| \gg \Omega^{-1}$, a correlação quântica recupera o resultado clássico no limite de altas temperaturas $k_B T \gg \hbar |t_1 - t_2|^{-1}$, e dele diverge, conforme se espera, para o regime de baixas temperaturas.

No trabalho seminal de Caldeira e Leggett,⁹ o procedimento adotado procura conciliar os aspectos fundamentais das referências,^{7,8} introduzindo, por um lado, um reservatório térmico quântico, modelado por um conjunto de osciladores harmônicos quânticos, e procurando, de outro lado, recuperar o comportamento clássico no limite de altas temperaturas. Para o tratamento da evolução temporal do acoplamento sistema-reservatório térmico, Caldeira e Leggett recorrem à teoria do funcional de influência de Feynman-Vernon. Após a derivação do operador densidade do universo, elimina-se as coordenadas do reservatório e recupera-se o operador densidade reduzido do sistema de interesse.

Ainda que outros trabalhos tenham realizado tarefas semelhantes ao desenvolvimento de Caldeira e Leggett,¹⁰⁻¹² através de técnicas outras que o funcional de influência, os resultados derivados aplicam-se ao regime de amortecimento fraco, aquele considerado por Weisskopf-Wigner. Ao contrário, o modelo de Caldeira e Leggett contempla igualmente o regime de amortecimento forte, prestando-se portanto a um amplo espectro de aplicações, inclusive no âmbito da Física de Estado Sólido, para o qual foi originalmente desenvolvido (tratamento da influência da dissipação no tunelamento quântico em sistemas macroscópicos¹³).

A física dos sistemas quânticos abertos foi também amplamente empregada na proposição de modelos para o processo da medida quântica. No início da década de 1980 nossa compreensão do processo de decoerência de estados quânticos (ou da transição da dinâmica micro para a macroscópica, o que compreende parte do processo de medida) foi consideravelmente ampliada pelo trabalho pioneiro de W. Zurek.^{14,15} Centrado na interpretação de von Neumann¹⁶ acerca do processo quântico de medida, o trabalho de Zurek considera o aparato como um sistema aberto, sujeito a ruídos inevitáveis introduzidos pelo

meio ambiente. Dessa forma, a interação com o aparato de medida induz a supressão dos termos de coerência de fase do operador densidade reduzido do sistema. A contribuição de Zurek, no entanto, mais que embasada num tratamento rigoroso da física da interação sistema-meio ambiente, apresenta considerações gerais sobre o que deveria representar o acoplamento sistema-aparato de medida (modelado de forma fenomenológica como que um toy model). Neste cenário, o modelo de Caldeira e Leggett propicia a Zurek uma plataforma adequada para uma melhor compreensão do mecanismo de decoerência de estados e para a derivação de quantidades essenciais à medida quântica como, por exemplo, o tempo de decoerência.

Em se tratando de modelos microscópicos do processo de decoerência devemos também mencionar a importante contribuição de Joos-Zeh,¹⁷ pela qual a emergência das propriedades clássicas decorre da asserção de que o sistema quântico atua como centro espalhador de partículas leves do meio ambiente. Ghirardi-Rimini-Weber-Pearle (GRWP),¹⁸⁻²⁰ num passo adiante às propostas de Zurek, Caldeira-Leggett e Joos-Zeh, abordam o processo de medida por uma equação de Schrodinger estocástica, cuja evolução descreve não somente o processo de decoerência, como também a competição pela qual apenas um dos elementos da diagonal do operador densidade reduzido sobrevive ao processo de medida.

Nas últimas décadas, as técnicas para o tratamento de sistemas quânticos abertos têm sido amplamente utilizados no contexto da teoria da informação quântica, em que cálculos da fidelidade de processos tais como a implementação de operações lógicas quânticas²¹ e o teletransporte de estados,^{22,23} são prementes. Mais que isso, estas técnicas, e fundamentalmente as equações mestras quânticas, tem sido empregadas na tarefa de se contornar, ou superar, os mecanismos de decoerência, no intuito de maximizar as fidelidades das operações de informação quântica. Citamos aqui, dentre outras, as técnicas de engenharia de reservatórios,²⁴⁻²⁶ subespaços livres de decoerência,²⁷ desacoplamento dinâmico,²⁸⁻³³ e por fim, guardando semelhanças com o desacoplamento dinâmico, a possibilidade do desacoplamento efetivo entre o sistema e o reservatório através da utilização de estados quânticos não estacionários.³⁴ Portanto, o advento da teoria da informação quântica contribui para uma maior visibilidade da física dos sistemas quânticos abertos, voltada basicamente, até a década de 1980, para a fundamentação da mecânica quântica, e a partir de então, para a construção das condições de possibilidade de implementação de operações lógicas quânticas.

Motivados pela teoria da informação quântica, mais especificamente pelo tratamento de perdas em circuitos de informação quântica, diversos trabalhos voltaram-se para a análise da dissipação em redes de sistemas acoplados. Dentre estes, citamos as realizações nas Refs.^{1,35} que abordam redes de osciladores harmônicos não ideais, quaisquer que sejam suas topologias, ou seja, a forma pela qual os osciladores acoplam-se entre si, o conjunto das magnitudes destes acoplamento, e por fim, o conjunto de suas frequências naturais. Os desenvolvimentos alcançados nas Refs.^{1,35} permitiram a derivação de resultados interessantes como dispositivos para o armazenamento dinâmico de estados em redes de osciladores³⁶ e a engenharia de subespaços livres de decoerência na presença, além da dissipação, do mecanismo de difusão decorrente da temperatura finita do reservatório térmico.³⁷

Em função dos desenvolvimentos obtidos em redes de osciladores dissipativos, e da crescente atenção voltada para a física dos sistemas quânticos abertos, nesta dissertação voltamos nossa atenção para as redes tratadas nas Refs.^{1,35-37} para o desenvolvimento de uma abordagem alternativa para o tratamento da interação sistema-reservatório térmico. Pinçando um dos osciladores da rede como o sistema de interesse, e considerando os demais osciladores como o reservatório térmico, derivamos então um tratamento algébrico e computacionalmente eficiente para a interação sistema-reservatório térmico. Esta técnica, de complexidade polinomial, é portanto adequada para o tratamento de redes de sistemas quânticos abertos e, conseqüentemente, às aplicações mais recentes da teoria da informação quântica.

No capítulo 2 propomos o método para o tratamento exato da interação entre sistema e um reservatório estruturado, enquanto o Capítulo 3 é reservado à análise do limite de um reservatório contínuo. Simulações computacionais, que objetivam demonstrar aspectos peculiares do método por nós desenvolvidos, são apresentadas no Capítulo 4, e por fim, no Capítulo 5 apresentamos nossas observações finais.

CAPÍTULO 2

TRATAMENTO ALGÉBRICO DA INTERAÇÃO SISTEMA-RESERVATÓRIO

Nesse capítulo, estudaremos os processos lineares que podem ocorrer em uma rede de osciladores. Vários sistemas físicos se comportam como osciladores quânticos, especialmente quando se encontram próximos à posições de equilíbrio. Vibrações de uma rede cristalina (fônons), íons em uma armadilha iônica, e vibrações do campo eletromagnético, em que cada modo (dado por um vetor de onda e uma polarização) corresponde a um oscilador. Técnicas de Óptica Linear, com o uso de materiais ópticos como polarizadores, lâminas birrefringentes, separadores de feixes (beam-splitters), permitem manipular o estado dessa rede de osciladores de forma linear.

Nosso foco principal será na modelagem da dinâmica não-unitária de sistemas quânticos abertos. Os postulados da Mecânica Quântica (especificamente a evolução unitária governada pela equação de Schrödinger) se aplicam a sistemas fechados. Para tratar os sistemas abertos, modelamos um reservatório como sendo uma coleção de modos harmônicos (em geral um número muito grande) que interagem linearmente com o sistema. No contexto de decaimento atômico (modelo de Wigner-Weisskopf), esses modos são os do campos eletromagnético no espaço livre que circunda o átomo. No contexto de cavidades, são os modos do campo eletromagnético fora da cavidade que se acoplam com o modo da cavidade através do espelho com refletividade inferior a um. Qualquer que seja sua origem, esses modos do reservatório são inacessíveis ao experimentador, que tem uma capacidade limitada de controle do seu estado inicial (por exemplo, através da temperatura),

e usualmente nenhuma forma de manipulação ou detecção.

O conjunto sistema aberto e reservatório, comumente chamado de universo, configura um sistema fechado e possui uma dinâmica unitária. A partir dessa dinâmica, calculamos a dinâmica do sistema (comumente chamada de dinâmica reduzida), e verificamos que ela é não-unitária. Essa dinâmica não-unitária é gerada por uma equação mestra, generalização da equação de von Neumann, que depende apenas de operadores do sistema e inclui os efeitos do reservatório de maneira fenomenológica. Mostraremos que, permitindo a possibilidade de coeficientes dependentes do tempo, uma equação mestra local no tempo pode descrever qualquer tipo de dinâmica não-unitária.

A evolução linear tem a propriedade de manter uma classe muito importante de estados, os gaussianos. Esses estados são completamente determinados pelos seus momentos de primeira e segunda ordem, e contêm os estados coerentes. Como esses formam uma base completa (na verdade, super-completa), qualquer estado inicial pode ser expandido como uma superposição de estados Gaussianos. Desse modo, especificar como estes evoluem é equivalente a especificar o mapa completo da evolução. Não há portanto necessidade de considerar o espaço de Hilbert completo, que tem dimensão infinita, pois o problema pode ser completamente resolvido no espaço de fase, que é um espaço vetorial de dimensão finita, com recursos computacionais polinomiais no número N de modos. Essa última condição implica que a dinâmica é simulável classicamente.

Veremos nesse capítulo que as equações de Heisenberg exigem o conhecimento da dinâmica completa do universo para que o comportamento do sistema seja conhecido. Apresentaremos então o método da função característica, que permite que calculemos apenas as informações que serão relevantes para determinar a dinâmica do sistema, sendo consequentemente um método mais econômico do ponto de vista computacional.

2.1 Dinâmica unitária linear

Um processo linear é aquele em que as equações de Heisenberg que o definem são lineares; para isso, o Hamiltoniano deve ser no máximo quadrático. No entanto, nem todas

as formas quadráticas são aceitáveis, pois o estado fundamental deve ser bem definido. Um Hamiltoniano quadrático que possua um estado fundamental bem definido é chamado de positivo-definido. Consideramos que o acoplamento entre os diferentes modos se dá através de suas coordenadas $\hat{q}_k$; essa é a situação comum para sistemas massivos, mas não apresenta realmente uma perda de generalidade. Dito isso, o nosso ponto de partida será o Hamiltoniano positivo-definido (aqui como em todo o resto da dissertação será adotado $\hbar = 1$)

$$H = \sum_{k=1}^N \left(\frac{1}{2m_k} \hat{p}_k^2 + \frac{m_k \varpi_k^2}{2} \hat{q}_k^2 \right) + \frac{1}{4} \sum_{k,j=1}^N \lambda_{k,j} (\hat{q}_k - \hat{q}_j)^2, \quad (2.1)$$

que é geral no sentido de que todos os modos podem estar acoplados com todos os demais, como mostrado na figura 2.1. Cada modo é caracterizado por uma massa m_k e uma frequência natural livre ϖ_k , e o acoplamento entre os modos é caracterizado por coeficientes $\lambda_{k,j}$ que formam uma matriz real e simétrica. Esse Hamiltoniano permite o tratamento do regime de acoplamento forte entre os osciladores, para o qual os acoplamentos são da mesma ordem de grandeza das frequências, sem que os modos normais resvalam para regimes não físicos (como frequências negativas, em que não há um estado de menor energia bem definido).

Sem perda de generalidade, os coeficientes $\lambda_{k,j}$ são simétricos. É útil separar esse Hamiltoniano em termos que representam a dinâmica isolada de cada grau de liberdade,

$$H_k = \frac{1}{2m_k} \hat{p}_k^2 + \sum_{j=1}^N \frac{\lambda_{k,j}}{2} \hat{q}_k^2, \quad (2.2)$$

e um termo de acoplamento entre eles

$$H_C = -\frac{1}{2} \sum_{k,j=1}^N \lambda_{k,j} \hat{q}_k \hat{q}_j. \quad (2.3)$$

A partir dos Hamiltonianos livres, definimos uma frequência livre

$$\omega_k = \sqrt{\varpi_k^2 + \frac{1}{m_k} \sum_{j=1}^N \lambda_{k,j}}, \quad (2.4)$$

Figura 2.1 – Topologia de uma rede de osciladores completamente interagentes, correspondente ao Hamiltoniano 2.1. Figura extraída de,¹ com permissão do autor.

além dos operadores de criação e destruição

$$\hat{q}_k = \sqrt{\frac{1}{2m_k\omega_k}} (a_k + a_k^\dagger) \quad (2.5a)$$

$$\hat{p}_k = \sqrt{\frac{m_k\omega_k}{2}} (-ia_k + ia_k^\dagger) . \quad (2.5b)$$

Isso permite escrever o Hamiltoniano livre como um oscilador de frequência ω_k (diferente da frequência livre ν_k):

$$H_k = \omega_k \left(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \right) . \quad (2.6)$$

A constante de acoplamento entre os modos pode ser definida como

$$g_{k,j} = \frac{\lambda_{k,j}}{2\sqrt{m_k\omega_k m_j\omega_j}} , \quad (2.7)$$

e os termos de acoplamento entre os osciladores,

$$H_C = -\frac{1}{2} \sum_{k,j=1}^N g_{k,j} \left(a_k + a_k^\dagger \right) \left(a_j + a_j^\dagger \right) , \quad (2.8)$$

podem ser divididos em dois tipos. O primeiro corresponde a uma troca de interações entre os modos, na forma $a_k^\dagger a_j$; são chamados de termos passivos ou girantes. O primeiro nome é consequência da conservação do número total de excitações; o segundo vem do fato de que, em um referencial girante, tais termos variam lentamente no tempo. O segundo tipo ($a_k a_j$) representa uma interação ativa, ou contra-girante, que cria ou destrói pares de excitações nos modos.

Além desses termos, podemos ter termos de bombeamento clássicos, na forma linear forma

$$H_B = i \sum_{k=1}^N \left(\beta_k a_k^\dagger - \beta_k^* a_k \right) , \quad (2.9)$$

ou quadrática,

$$H_Q = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \left(\eta_k a_k^{\dagger 2} - \eta_k^* a_k^2 \right) , \quad (2.10)$$

O Hamiltoniano quadrático mais geral possível (incluindo bombeamentos) pode ser escrito de uma forma mais compacta como

$$H = \sum_{k,j=1}^N G_{k,j} a_k^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{k,j=1}^N \left(F_{k,j} a_k^\dagger a_j^\dagger + F_{k,j}^* a_k a_j \right) + i \sum_{k=1}^N \left(\beta_k a_k^\dagger - \beta_k^* a_k \right) . \quad (2.11)$$

A condição de hermiticidade do Hamiltoniano implica que a matriz G é hermiteana, e a matriz F é simétrica:

$$G_{k,j} = G_{j,k}^* \quad (2.12a)$$

$$F_{k,j} = F_{j,k} \quad (2.12b)$$

Como ilustração, para o Hamiltoniano 2.1, as matrizes G e F assumem a forma

$$G_{k,j} = \delta_{k,j} \omega_k - (1 - \delta_{k,j}) g_{k,j} \quad (2.13)$$

$$F_{k,j} = -(1 - \delta_{k,j}) g_{k,j} . \quad (2.14)$$

Como já dito, a renormalização das frequências naturais dada pela equação 2.4 é necessária para evitar situações não físicas. A condição matemática para que o Hamiltoniano seja positivo-definido é que a seguinte matriz de dimensão $2N$ seja positivo-definida (isso é, possua todos os auto-valores positivos):

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \Re(G + F) & \Im(F - G) \\ \Im(F - G) & \Re(G - F) \end{pmatrix} \geq 0 . \quad (2.15)$$

2.1.1 Ondas girantes e a aproximação de James

O Hamiltoniano 2.11 é a soma de termos de dinâmica livre de cada oscilador (equação 2.6) e termos de acoplamento entre os modos (equação 2.8). O primeiro, por ter uma solução trivial, pode ser usado para definir uma representação de interação, em que os operadores de campo a_k e $a_k^\dagger$ variam no tempo governados pelo Hamiltoniano livre, enquanto o estado varia no tempo governado pelo Hamiltoniano de interação

$$\begin{aligned} H_I = & -\frac{1}{2} \sum_{k,j=1}^N g_{k,j} \left(a_k^\dagger a_j e^{i(\omega_k - \omega_j)t} + a_k a_j^\dagger e^{-i(\omega_k - \omega_j)t} \right) \\ & -\frac{1}{2} \sum_{k,j=1}^N g_{k,j} \left(a_k^\dagger a_j^\dagger e^{i(\omega_k + \omega_j)t} + a_k a_j e^{-i(\omega_k + \omega_j)t} \right) . \end{aligned} \quad (2.16)$$

Esse Hamiltoniano está na forma da equação C.3 do apêndice C (que é por sua vez baseado na referência³⁸), permitindo utilizar as técnicas ali descritas para obter um Hamiltoniano efetivo.

A primeira aproximação consiste em desprezar os termos que variam muito rapida-

mente no tempo. Assumimos que para a maioria dos modos vale que $\omega_k \approx \omega_j$, ou seja,

$$|\omega_k - \omega_j| \ll |\omega_k + \omega_j| . \quad (2.17)$$

Assim, o último termo do Hamiltoniano 2.16 varia no tempo de forma muito mais rápida do que o primeiro. A primeira aproximação de James, que consiste em simplesmente desprezá-los, é chamado de aproximação de ondas girantes:

$$H_{RWA} = -\frac{1}{2} \sum_{k,j=1}^N \left(a_k^\dagger a_j e^{i(\omega_k - \omega_j)t} + a_k a_j^\dagger e^{-i(\omega_k - \omega_j)t} \right) . \quad (2.18)$$

Na notação da equação 2.11, isso é equivalente a fazer $F_{k,j} = 0$.

A segunda aproximação de James é descrita pelas equações C.31 e C.33. Um fato curioso que ocorre é que o Hamiltoniano efetivo de segunda ordem (C.31) contém apenas termos girantes da forma $a_k^\dagger a_j$, mesmo quando consideramos os termos contra-girantes no Hamiltoniano de interação:

$$H_2 = -\frac{1}{4} \sum_{k,j} \left(\sum_{n \neq k,j} g_{k,n} g_{j,n} \left(\frac{1}{\omega_n + \omega_k} + \frac{1}{\omega_n + \omega_j} \right) \right) e^{i(\omega_k - \omega_j)t} a_k^\dagger a_j . \quad (2.19)$$

É possível também mostrar que o termo dissipativo é pequeno. No limite de acoplamento fraco, em que uma expansão em série de potências nos acoplamentos $g_{k,j}$ faz sentido, os termos contra-girantes representam apenas uma leve correção na dinâmica, que é dominada pelos termos girantes. Isso, no entanto, não ocorre quando os acoplamentos são da mesma ordem de grandeza das frequências.

2.1.2 Equações de Heisenberg

Um possível método³⁹ para resolver a dinâmica gerada pelo Hamiltoniano 2.11 são as equações de Heisenberg

$$\frac{d}{dt}a_k = -i \sum_{j=1}^N \left(G_{k,j} a_j + F_{k,j} a_j^\dagger \right) + \beta_k \quad (2.20a)$$

$$\frac{d}{dt}a_k^\dagger = i \sum_{j=1}^N \left(G_{k,j}^* a_j^\dagger + F_{k,j}^* a_j \right) + \beta_k^* . \quad (2.20b)$$

Embora essa equação esteja definida em um espaço de Hilbert de dimensão infinita, a relação entre os operadores no tempo t e os operadores no tempo 0 é uma relação linear em um espaço vetorial de dimensão finita:

$$a_k(t) = \sum_{j=1}^N \left(U_{k,j}(t) a_j + V_{k,j}^*(t) a_j^\dagger \right) + \omega_k(t) \quad (2.21a)$$

$$a_k^\dagger(t) = \sum_{j=1}^N \left(U_{k,j}^*(t) a_j^\dagger + V_{k,j}(t) a_j \right) + \omega_k^*(t) . \quad (2.21b)$$

As equações de Heisenberg 2.20 são equivalentes aos sistemas lineares

$$\frac{d}{dt}U_{k,n} = -i \sum_{j=1}^N (G_{k,j} U_{j,n} + F_{k,j} V_{j,n}) \quad (2.22a)$$

$$\frac{d}{dt}V_{k,n} = i \sum_{j=1}^N (G_{k,j}^* V_{j,n} + F_{k,j}^* U_{j,n}) , \quad (2.22b)$$

e

$$\frac{d}{dt}\omega_k = -i \sum_{j=1}^N (G_{k,j} \omega_j + F_{k,j} \omega_j^*) + \beta_k \quad (2.23a)$$

$$\frac{d}{dt}\omega_k^* = i \sum_{j=1}^N (G_{k,j}^* \omega_j^* + F_{k,j}^* \omega_j) + \beta_k^* . \quad (2.23b)$$

O segundo índice é mantido fixo nas equações 2.22, e portanto o problema se separa em N sistemas lineares independentes (um para cada valor de $n = 1, \dots, N$). Cada um desses sistemas tem dimensão $2N$, e todos têm a mesma forma (mesmas equações); a diferença se encontra apenas nas condições iniciais.

$$U_{k,n}(0) = \delta_{k,n} \quad (2.24a)$$

$$V_{k,n}(0) = 0. \quad (2.24b)$$

A condição inicial para a equação 2.23 é

$$\omega_k(0) = 0. \quad (2.25)$$

As equações 2.21 são a solução completa do problema, pois o valor esperado de qualquer operador pode ser calculado como

$$\left\langle f\left(\left\{a_k^\dagger\right\},\left\{a_k\right\}\right)\right\rangle_t = \left\langle f\left(\left\{a_k^\dagger(t)\right\},\left\{a_k(t)\right\}\right)\right\rangle_0. \quad (2.26)$$

2.1.3 Representação de estados coerentes

As equações de Heisenberg 2.20 possuem a mesma forma que a equação clássica de movimento. No entanto, não é apenas nesse sentido que podemos dizer que a evolução ditada pelo Hamiltoniano quadrático é clássica. Tal evolução também pode, sob certas circunstâncias, preservar o caráter clássico dos estados mais clássicos possíveis de uma rede de osciladores, que são os estados coerentes. Esses estados são chamados de clássicos porque possuem a mínima incerteza possível, sendo bem localizados em ambas as quadraturas:

$$\Delta x_1 = \Delta x_2 = \frac{1}{2} \quad (2.27)$$

As quadraturas correspondem à parte real a à parte imaginária do operador de criação

a , que são por sua vez proporcionais aos operadores de posição e momento.

$$\hat{x}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger) \quad (2.28a)$$

$$\hat{x}_2 = \frac{1}{i\sqrt{2}} (a - a^\dagger) \quad (2.28b)$$

Matematicamente, um estados coerente de N modos é um auto-estado dos operadores a_k ,

$$a_k |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle = \alpha_k |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle . \quad (2.29)$$

Na equação 2.20, vemos que, se $F_{k,j} = 0$ (o que significa realizar a aproximação de ondas girantes), os operadores evoluídos $a_k(t)$ são uma função apenas dos operadores a_j , e portanto um estado coerente permanece coerente durante toda a sua evolução. O estado coerente de N modos é um estado produto; um processo passivo não é capaz de criar emaranhamento nesse caso (no entanto, outros estados iniciais separáveis podem evoluir para um estado emaranhado).

$$|\alpha_1\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_N\rangle \rightarrow |\alpha_1(t)\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_N(t)\rangle , \quad (2.30)$$

com

$$\alpha_k(t) = \sum_{j=1}^N U_{k,j}(t) \alpha_j + \omega_k(t) \quad (2.31)$$

Os valores médios dos momentos de primeira ordem seguem as suas trajetórias clássicas, acompanhadas pela nuvem de incerteza quântica característica de um estado coerente.³⁹ A simplificação trazida à análise é considerável, pois a condição $V = 0$ implica que a dimensão da equação 2.22 é reduzida de $2N$ para N ,

$$\frac{d}{dt} U_{k,n} = -i \sum_{j=1}^N G_{k,j} U_{j,n} \quad (2.32)$$

$$\frac{d}{dt} \omega_k = -i \sum_{j=1}^N G_{k,j} \omega_j + \beta_k . \quad (2.33)$$

A condição $F_{k,j} = 0$, ou seja, a ausência de termos do tipo $a_k a_j$ ou $a_k^\dagger a_j^\dagger$, é de grande interesse prático, pois normalmente em uma primeira aproximação os termos $F_{k,j}$ são

desprezados. Esse procedimento é conhecido como a aproximação de ondas girantes.

Devido às suas propriedades, é interessante expandir um estado qualquer em uma base de estados coerentes. A chamada representação P de Glauber-Sudarshan corresponde à expansão diagonal:

$$\rho = \int d^{2N} \{\alpha\} P(\{\alpha\}) |\{\alpha\}\rangle \langle \{\alpha\}| . \quad (2.34)$$

Na representação de Schrodinger, a evolução nessa forma é bastante simples,

$$\rho(t) = \int d^{2N} \{\alpha\} P(\{\alpha\}) |\{\alpha(t)\}\rangle \langle \{\alpha(t)\}| , \quad (2.35)$$

com $\alpha_k(t)$ dado por 2.31 e $U(t)$ e $\omega(t)$ obedecendo às equações 2.32 e 2.33. No caso de um estado inicial coerente, a função $P(\{\alpha\}, \{\alpha^*\})$ se reduz a uma delta de Dirac, e a equação 2.35 indica imediatamente que o estado permanece coerente, mas com os valores médios evoluindo de acordo com a equação de movimento clássica.

Para o caso mais geral, é possível transformar a equação de von Neumann para o operador densidade em uma equação diferencial parcial para a função P , buscando uma correspondência entre super-operadores no espaço de Hilbert e no espaço de fase onde a função P é definida (um super-operador é uma operação linear que associa dois operadores). No espaço de Hilbert, os super-operadores que atuam sobre ρ são a multiplicação, à esquerda ou à direita, pelos operadores a_k ou $a_k^\dagger$. No espaço de fase, eles correspondem a combinações de P e derivadas:

$$a_k \rho \rightarrow \alpha_k P \quad (2.36a)$$

$$\rho a_k \rightarrow \alpha_k P - \frac{\partial P}{\partial \alpha_k^*} \quad (2.36b)$$

$$a_k^\dagger \rho \rightarrow \alpha_k^* P - \frac{\partial P}{\partial \alpha_k} \quad (2.36c)$$

$$\rho a_k^\dagger \rightarrow \alpha_k^* P . \quad (2.36d)$$

A equação de von Neumann para o Hamiltoniano 2.11 se traduz como

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} = & -i \sum_{k,j=1}^N (G_{k,j}^* \alpha_j^* + F_{k,j}^* \alpha_j) \frac{\partial P}{\partial \alpha_k^*} + i \sum_{k,j=1}^N (G_{k,j} \alpha_j + F_{k,j} \alpha_j^*) \frac{\partial P}{\partial \alpha_k} \\ & - \frac{i}{2} \sum_{k,j=1}^N \left(F_{k,j} \frac{\partial^2 P}{\partial \alpha_k \alpha_j} - F_{k,j}^* \frac{\partial^2 P}{\partial \alpha_k^* \alpha_j^*} \right) + \sum_{k=1}^N (\beta_k^* \alpha_k - \beta_k \alpha_k^*) P. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Na presença dos termos contra-girantes, essa equação envolve derivadas de segunda ordem. Veremos na próxima subseção que é possível obter uma equação diferencial de primeira ordem que descreva a evolução da rede de osciladores mesmo na presença desses termos.

2.1.4 Função característica

No caso que estamos estudando, o espaço de Hilbert é desnecessariamente complicado, com a sua dimensão infinita, pois todas as relações entre observáveis em diferentes tempos são lineares. Por esse motivo, mudaremos também a descrição do estado quântico para uma forma definida em um espaço de fase, no qual a evolução linear corresponde a uma simples deformação desse espaço. Dentre as formas possíveis de se fazer isso, a que se mostra mais conveniente é através da função característica de ordenamento simétrico, que é simplesmente o valor esperado do operador de deslocamento (equação A.9), e contém toda a informação sobre o estado.

Utilizamos o mesmo método de buscar uma correspondência entre os super-operadores no espaço de Hilbert e no espaço de fase. Essa correspondência é diferente do caso anterior, e é dada por

$$a_k \rho \rightarrow -\frac{\partial \chi}{\partial \alpha_k^*} - \frac{\alpha_k}{2} \chi \quad (2.38a)$$

$$\rho a_k \rightarrow -\frac{\partial \chi}{\partial \alpha_k^*} + \frac{\alpha_k}{2} \chi \quad (2.38b)$$

$$a_k^\dagger \rho \rightarrow \frac{\partial \chi}{\partial \alpha_k} - \frac{\alpha_k^*}{2} \chi \quad (2.38c)$$

$$\rho a_k^\dagger \rightarrow \frac{\partial \chi}{\partial \alpha_k} + \frac{\alpha_k^*}{2} \chi. \quad (2.38d)$$

Essa diferença tem duas origens. A primeira é que estamos considerando uma função característica, que é uma transformada de Fourier da função de quase probabilidade. A segunda é que a função característica que definimos corresponde ao ordenamento simétrico do operador de deslocamento, enquanto a função P está associada ao ordenamento normal.

Com essas considerações, chegamos à equação diferencial

$$\begin{aligned} \frac{\partial \chi}{\partial t} = & -i \sum_{k,j=1}^N (G_{k,j}^* \alpha_j^* + F_{k,j}^* \alpha_j) \frac{\partial \chi}{\partial \alpha_k^*} \\ & + i \sum_{k,j=1}^N (G_{k,j} \alpha_j + F_{k,j} \alpha_j^*) \frac{\partial \chi}{\partial \alpha_k} + \sum_{k=1}^N (\beta_k^* \alpha_k - \beta_k \alpha_k^*) \chi, \end{aligned} \quad (2.39)$$

que possui uma solução bastante simples na forma de um produto de um termo de deslocamento e de um termo de fluxo no espaço de fase, dada pelo ansatz (uma hipótese, ou proposta de solução, que deve ser testada):

$$\chi(\{\alpha_k\}, t) = \exp \left(\sum_{k=1}^N (\alpha_k \tilde{\omega}_k^* - \alpha_k^* \tilde{\omega}_k) \right) \chi(\{\alpha_k(t)\}, 0). \quad (2.40)$$

O primeiro termo do lado direito corresponde ao deslocamento do espaço de fase causado pelos termos de bombeamento, e obedecem às equações

$$\frac{d}{dt} \tilde{\omega}_k = -i \sum_{j=1}^N (G_{k,j} \tilde{\omega}_j + F_{k,j} \tilde{\omega}_j^*) + \beta_k \quad (2.41a)$$

$$\frac{d}{dt} \tilde{\omega}_k^* = i \sum_{j=1}^N (G_{k,j}^* \tilde{\omega}_j^* + F_{k,j}^* \tilde{\omega}_j) + \beta_k^*, \quad (2.41b)$$

idênticas às 2.23. Além disso, obedecem às mesmas condições iniciais, e são portanto iguais:

$$\tilde{\omega}_k(t) = \omega_k(t). \quad (2.42)$$

A função característica mantém a sua forma (a menos de um deslocamento) durante a evolução, mas os coeficientes $\alpha(t)$ (as coordenadas do espaço de fase) sofrem uma

transformação induzida por

$$\frac{d}{dt}\alpha_k = i \sum_{j=1}^N (G_{k,j}\alpha_j + F_{k,j}\alpha_j^*) \quad (2.43a)$$

$$\frac{d}{dt}\alpha_k^* = -i \sum_{j=1}^N (G_{k,j}^*\alpha_j^* + F_{k,j}^*\alpha_j) . \quad (2.43b)$$

Essas equações são similares às equações de Heisenberg 2.20, e escrevemos a solução na forma

$$\alpha_k(t) = \sum_{j=1}^N \left(\tilde{U}_{k,j}(t) \alpha_j + \tilde{V}_{k,j}^*(t) \alpha_j^* \right) \quad (2.44a)$$

$$\alpha_k^*(t) = \sum_{j=1}^N \left(\tilde{U}_{k,j}^*(t) \alpha_j^* + \tilde{V}_{k,j}(t) \alpha_j \right) . \quad (2.44b)$$

As equações análogas a 2.22 são

$$\frac{d}{dt}\tilde{U}_{k,n} = i \sum_{j=1}^N \left(G_{k,j}\tilde{U}_{j,n} + F_{k,j}\tilde{V}_{j,n} \right) \quad (2.45a)$$

$$\frac{d}{dt}\tilde{V}_{k,n} = -i \sum_{j=1}^N \left(G_{k,j}^*\tilde{V}_{j,n} + F_{k,j}^*\tilde{U}_{j,n} \right) . \quad (2.45b)$$

Para estabelecer uma relação entre os coeficientes $\tilde{U}, \tilde{V}$ e os coeficientes U, V , calculamos os momentos de primeira ordem a partir da função característica:

$$\langle a_k \rangle_t = \sum_{j=1}^N \left(\tilde{U}_{j,k}(t) \langle a_j \rangle_0 - \tilde{V}_{j,k}^*(t) \langle a_j^\dagger \rangle_t \right) + \omega_k(t) \quad (2.46a)$$

$$\langle a_k^\dagger \rangle_t = \sum_{j=1}^N \left(\tilde{U}_{j,k}^*(t) \langle a_j^\dagger \rangle_0 - \tilde{V}_{j,k}(t) \langle a_j \rangle_t \right) + \omega_k^*(t) . \quad (2.46b)$$

Uma comparação entre as equações 2.21 e 2.46 permite concluir que

$$\tilde{U}_{j,k}(t) = U_{k,j}(t) \quad (2.47a)$$

$$\tilde{V}_{j,k}(t) = -V_{k,j}(t) . \quad (2.47b)$$

Com essas associações, podemos reescrever as equações 2.45 em termos de U e V na forma:

$$\frac{d}{dt}U_{n,k} = i \sum_{j=1}^N (U_{n,j}G_{j,k}^* - V_{n,j}F_{j,k}) \quad (2.48a)$$

$$\frac{d}{dt}V_{n,k} = -i \sum_{j=1}^N (V_{n,j}G_{j,k} - U_{n,j}F_{j,k}^*) . \quad (2.48b)$$

Essas equações e as 2.22 têm uma diferença importante. Naquelas, o segundo índice era mantido fixo, o que significa que cada coluna de U e V pode ser calculada de forma independente das demais. Nessas, o primeiro índice é mantido fixo, e as matrizes U e V são construídas linha por linha. Essa diferença vem do fato de que a função característica é definida não no espaço de fase propriamente dito, mas no espaço de fase dual (que estão relacionados por uma transformada de Fourier, mas têm a mesma estrutura).

2.1.5 Transformação simplética

Na representação de Schrodinger, os estados em tempos diferentes de um sistema fechado são relacionados por uma transformação unitária. Na representação de Heisenberg, o mesmo fato é expresso pela regra de transformação das relações de comutação

$$\left[\hat{A}(t), \hat{B}(t) \right] = U^\dagger(t, t_0) \left[\hat{A}(t_0), \hat{B}(t_0) \right] U(t, t_0) . \quad (2.49)$$

Aplicado às transformações 2.21, isso implica em

$$\sum_{m=1}^N (U_{k,m} V_{j,m} - U_{j,m} V_{k,m}) = 0 \quad (2.50a)$$

$$\sum_{m=1}^N (U_{k,m}^* U_{j,m} - V_{k,m}^* V_{j,m}) = \delta_{k,j} . \quad (2.50b)$$

Isso define uma estrutura simplética (propriedades da estrutura simplética são discutidas no apêndice D). Explicitamente, a matriz de dimensão $2N$ definida pelos blocos

$$W = \begin{pmatrix} \{U\} & \{V^*\} \\ \{V\} & \{U^*\} \end{pmatrix} , \quad (2.51)$$

satisfaz a relação

$$W^T \Omega W = \Omega , \quad (2.52)$$

onde

$$\Omega = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{I} \\ -\mathcal{I} & 0 \end{pmatrix} . \quad (2.53)$$

É importante dizer que a definição usual de matriz simplética são as matrizes de entradas reais que satisfazem 2.52; como W assim definido não é real, não é também uma matriz simplética. Porém, é possível obter uma matriz simplética relacionada a W considerando a transformação das quadraturas, que por serem reais implicam em uma matriz de transformação real:

$$Z = \begin{pmatrix} \{\Re(U + V)\} & \{-\Im(U + V)\} \\ \{\Im(U - V)\} & \{\Re(U - V)\} \end{pmatrix} . \quad (2.54)$$

Uma transformação simplética e linear é a contrapartida no espaço de fase de uma transformação unitária e linear no espaço de Hilbert.

2.1.6 Mapa Gaussiano

Na linguagem da teoria de informação quântica, um mapa é uma operação linear aplicada a um operador densidade, que resulta em um outro operador densidade. Para isso, essa operação deve ser, além de linear, completamente positiva.⁴⁰ A evolução de um sistema pode ser expressa por uma família de mapas, cada um dos quais associa o estado inicial ao estado em um instante específico de tempo:

$$\rho(t) = \mathcal{U}_t(\rho(0)) . \quad (2.55)$$

A equação 2.40 é um exemplo de mapa no espaço de fase, pois fornece uma regra para obter a função característica no tempo t (o lado esquerdo da equação) em termos da função característica no instante inicial (que aparece no seu lado direito).

A solução 2.40 preserva a forma Gaussiana da função característica. Como os estados que possuem essa forma são de grande importância (pois contém os estados coerentes, os comprimidos e os térmicos), é interessante tratar a evolução gerada pelo Hamiltoniano quadrático pela alteração que ele causa nos momentos de primeira e segunda ordem que definem um estado Gaussiano:

$$x(t) = W(t) r(0) + \omega(t) \quad (2.56a)$$

$$C(t) = W(t) V(0) W^T(t) , \quad (2.56b)$$

onde $x(t)$ e $C(t)$ são o vetor de quadraturas e a matriz de covariância, respectivamente:

$$x(t) = \begin{pmatrix} \{\langle a_k \rangle\} \\ \{\langle a_k^\dagger \rangle\} \end{pmatrix}_t \quad (2.57)$$

$$C(t) = \begin{pmatrix} \{\langle a_k a_j \rangle - \langle a_k \rangle \langle a_j \rangle\} & \left\{ \frac{1}{2} \langle a_k a_j^\dagger + a_j^\dagger a_k \rangle - \langle a_k \rangle \langle a_j^\dagger \rangle \right\} \\ \left\{ \frac{1}{2} \langle a_k^\dagger a_j + a_j a_k^\dagger \rangle - \langle a_k^\dagger \rangle \langle a_j \rangle \right\} & \left\{ \langle a_k^\dagger a_j^\dagger \rangle - \langle a_k^\dagger \rangle \langle a_j^\dagger \rangle \right\} \end{pmatrix}_t . \quad (2.58)$$

A afirmação de que $W(t)$ e $\omega(t)$ definem completamente a evolução significa que existe

uma correspondência unívoca entre esses parâmetros e um conjunto de mapas no espaço de Hilbert.

$$\rho(t) = \mathcal{U}_{W,\omega}(\rho(0)) \quad . \quad (2.59)$$

Essas transformações são definidas em um espaço vetorial de dimensão finita, que cresce linearmente com o número de graus de liberdade. É possível portanto simular de forma eficiente esse mapa em um computador clássico, com recursos que crescem polinomialmente com número de graus de liberdade. Para que seja possível realizar computação quântica com um sistema de variáveis contínuas, é preciso uma fonte de não-classicalidade, que pode vir de duas maneiras. A primeira é através de termos não-lineares no Hamiltoniano, como por exemplo o efeito Kerr (que gera um termo na forma $a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger a_2$); nesse caso, a análise aqui feita não se aplica. A segunda maneira é através de um estado inicial não-Gaussiano, que pode ser um estado de número ou um estado de fase cúbica.⁴¹ As equações 2.56 ainda são válidas, pois são deduzidas pelo formalismo de Heisenberg sem qualquer hipótese sobre o estado inicial. Apenas o comportamento dos momentos de ordem superior são afetados quando o estado inicial não é Gaussiano.

2.2 Dinâmica reduzida

Um sistema quântico aberto interage com graus de liberdade sobre os quais um experimentador não tem qualquer tipo de controle ou possibilidade de efetuar a medida. Embora essas interações possam e devam ser levadas em conta pela teoria, é conveniente que ao final a descrição seja realizada apenas em termos de graus de liberdade sobre os quais se tem acesso experimental. Esses últimos referem-se ao sistema de interesse, enquanto os primeiros referem-se ao reservatório. O sistema e o reservatório considerados em conjunto é chamado de universo.

O universo forma um sistema fechado e possui uma dinâmica unitária, como estudado na seção 2.1. Porém, o reservatório possui em geral um grande número de graus de liberdade, muito maior do que o do sistema. Uma solução geral da dinâmica do universo contém uma grande quantidade de informação (aqui entendida no sentido clássico) sobre o estado do reservatório que não é acessível ao experimentador, e portanto não tem utilidade.

Veremos nessa seção que o método de Heisenberg exige o conhecimento da dinâmica completa do universo, enquanto o método da função característica permite que calculemos apenas as informações que serão relevantes para determinar a dinâmica do sistema.

Para começar a análise, separamos as dimensões do espaço de fase em dois conjuntos:

$$\mathcal{S} = \{1, \dots, N_S\} \quad (2.60a)$$

$$\mathcal{R} = \{N_S + 1, \dots, N\} . \quad (2.60b)$$

O fato de que estamos interessados apenas no comportamento do sistema implica que os únicos observáveis de interesse são da forma

$$\hat{F} = F(\{a_k(t)\}_{k \in \mathcal{S}}) = F\left(\left\{\sum_{j=1}^N (U_{k,j}a_k + V_{k,j}^*a_j^\dagger)\right\}_{k \in \mathcal{S}}\right) . \quad (2.61)$$

Precisamos portanto apenas dos coeficientes $U_{k,j}$ e $V_{k,j}$ para os quais $k \in \mathcal{S}$, ou seja, precisamos de apenas N_S linhas de U e V , isto é, apenas uma no caso em que o sistema de interesse reduz-se a um único oscilador. As equações de Heisenberg são resolvidas coluna-por-coluna; resolvê-la completamente implica em uma grande quantidade de informação (no sentido clássico) que é calculada e então descartada. A equação 2.48, deduzida a partir da equação diferencial para a função característica, é resolvida linha-por-linha, e precisamos resolver apenas N_S linhas para obter a dinâmica do sistema, ao invés das N colunas do método de Heisenberg. Isso pode representar um considerável ganho computacional.

2.2.1 Traço parcial e função característica

No espaço de Hilbert, o procedimento para eliminar os graus de liberdade do reservatório é o traço parcial. No espaço de fase onde a função característica é definida, o procedimento análogo é calculá-la na origem do sistema de coordenadas referente ao reservatório (lembramos que o espaço de fase possui duas dimensões para cada grau de liberdade). A função característica do universo é a 2.40. Já a função característica redu-

zida, para o sistema apenas, é

$$\chi(\{\alpha_k\}_{k \in \mathcal{S}}, t) = \exp\left(\sum_{k=1}^{N_S} (\alpha_k \omega_k^* - \alpha_k^* \omega_k)\right) \chi\left(\left\{\sum_{j=1}^{N_S} (U_{j,k} \alpha_j - V_{j,k}^* \alpha_j^*)\right\}, 0\right). \quad (2.62)$$

Uma hipótese normalmente feita no tratamento da interação sistema-reservatório é que, no instante inicial, os estados do sistema e do reservatório são decorrelacionados. Isso implica que a função característica pode ser escrita como um produto:

$$\chi(\{\alpha_k\}, 0) = \chi_S(\{\alpha_k\}_{k \in \mathcal{S}}, 0) \chi_R(\{\alpha_k\}_{k \in \mathcal{R}}). \quad (2.63)$$

Os graus de liberdade do reservatório são de acessibilidade limitada ao experimenter, ao contrário dos graus de liberdade do sistema. Por esse motivo, manteremos o estado inicial do sistema como arbitrário no caso geral, mas vamos considerar o estado inicial do reservatório como um estado Gaussiano. De fato, tudo o que podemos manipular sobre o estado do reservatório são parâmetros como a temperatura, que influencia os momentos de segunda ordem; dado essas restrições, tomamos o estado de maior entropia para incorporar a nossa incerteza.

A função característica do reservatório, consistente com as equações A.12 e A.13 e com forma Gaussiana, é

$$\begin{aligned} \chi_R(\{\alpha_k\}_{k \in \mathcal{R}}) &= \exp\left(\sum_{k \in \mathcal{R}} \left(\langle a_k^\dagger \rangle \alpha_k - \langle a_k \rangle \alpha_k^*\right)\right) \\ &\times \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{k \in \mathcal{R}} |\alpha_k|^2 - \sum_{k,j \in \mathcal{R}} \langle a_k^\dagger a_j \rangle \alpha_k \alpha_j^*\right) \\ &\times \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{k,j \in \mathcal{R}} \langle a_k^\dagger a_j^\dagger \rangle \alpha_k \alpha_j + \frac{1}{2} \sum_{k,j \in \mathcal{R}} \langle a_k a_j \rangle \alpha_k^* \alpha_j^*\right). \end{aligned} \quad (2.64)$$

Combinando esse resultado com as equações 2.62 e 2.63, temos que a solução final é

o produto de três termos:

$$\begin{aligned}
\chi_S(\{\alpha_k\}_{k \in \mathcal{S}}, t) = & \exp\left(\sum_{k=1}^{N_S} (\alpha_k \eta_k^* - \alpha_k^* \eta_k)\right) \\
& \times \exp\left(-\sum_{k,j \in \mathcal{S}} P_{k,j} \alpha_k \alpha_j^* + \frac{1}{2} \sum_{k,j \in \mathcal{S}} Q_{k,j}^* \alpha_k \alpha_j + \frac{1}{2} \sum_{k,j \in \mathcal{S}} Q_{k,j} \alpha_k^* \alpha_j^*\right) \\
& \times \chi_S\left(\left\{\sum_{j=1}^{N_S} (A_{k,j} \alpha_j - B_{k,j}^* \alpha_j^*)\right\}, 0\right). \quad (2.65)
\end{aligned}$$

Os dois primeiros são termos inomogêneos, que não dependem do estado inicial do sistema, sendo um termo de primeira e outro de segunda ordem. O termo de primeira ordem tem duas origens, termos de bombeio no Hamiltoniano do universo, e deslocamentos dos modos no estado inicial do reservatório.:

$$\frac{d}{dt} \eta_k = -i \sum_{j=1}^N (G_{k,j} \eta_j + F_{k,j} \eta_j^*) + \beta_k \quad (2.66a)$$

$$\frac{d}{dt} \eta_k^* = i \sum_{j=1}^N (F_{k,j}^* \eta_j + G_{k,j}^* \eta_j^*) + \beta_k^* \quad (2.66b)$$

$$\eta_k(0) = \begin{cases} 0 & k \in \mathcal{S} \\ \langle a_k \rangle & k \in \mathcal{R} \end{cases}. \quad (2.67)$$

Apesar desse sistema ter dimensão $2N$, apenas os coeficientes com $k \in \mathcal{S}$ aparecem na solução. Entretanto, a solução desse sistema é geralmente nula.

O termo homogêneo de segunda ordem têm origem nos momentos de segunda ordem do reservatório. Ele nunca é nulo, devido ao princípio de incerteza de Heisenberg:

$$\begin{aligned}
P_{k,j} = & \sum_{m,n \in \mathcal{R}} \left(\langle a_m^\dagger a_n \rangle + \frac{1}{2} \delta_{m,n} \right) (U_{k,m} U_{j,n}^* + V_{k,n} V_{j,m}^*) \\
& + \sum_{m,n \in \mathcal{R}} (\langle a_m a_n \rangle V_{k,m} U_{j,n}^* + \langle a_m^\dagger a_n^\dagger \rangle V_{j,n}^* U_{k,m}) \quad (2.68)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Q_{k,j} = & \sum_{m,n \in \mathcal{R}} (\langle a_m a_n \rangle U_{k,m}^* U_{j,n}^* + \langle a_m^\dagger a_n^\dagger \rangle V_{k,m}^* V_{j,n}^*) \\
& + \sum_{m,n \in \mathcal{R}} \left(\langle a_m^\dagger a_n \rangle + \frac{1}{2} \delta_{m,n} \right) (U_{k,m}^* V_{j,n}^* + U_{j,m}^* V_{k,n}^*) . \quad (2.69)
\end{aligned}$$

O último termo é um termo homogêneo, que depende do estado inicial do sistema, e de matriz A e B , de dimensão N_S , obtidas a partir do truncamento de U e V , respectivamente:

$$A_{k,j} = U_{k,j} \quad (k, j \in \mathcal{S}) \quad (2.70a)$$

$$B_{k,j} = V_{k,j} \quad (k, j \in \mathcal{S}) . \quad (2.70b)$$

Uma diferença muito importante existe entre as matrizes Z (equação 2.54) e a matriz T obtida pela mesma fórmula com A e B substituindo U e V . A primeira é simplética, enquanto a última não o é. Além disso, temos em geral que, para tempos suficientemente longos, $T(t) \approx 0$, de modo que o estado final não depende do estado inicial, mas apenas dos termos inomogêneos. Em alguns contextos, esse processo é chamado de termalização.

2.2.2 Mapa Gaussiano

Um estado Gaussiano tem a propriedade de que todos os estados reduzidos, quando qualquer tipo de partição é feita, são também Gaussianos. Assim, o mapa reduzido também tem a propriedade de ser Gaussiano e completamente determinado pela transformação dos momentos de primeira e segunda ordem:

$$r(t) = S(t) r(0) + \eta(t) \quad (2.71a)$$

$$C(t) = S(t) C(0) W(t)^T + R(t) . \quad (2.71b)$$

O mapa é definido pelo vetor $\eta(t)$ e pelas matrizes $S(t)$ e $R(t)$:

$$S(t) = \begin{pmatrix} \{A\} & \{B^*\} \\ \{B\} & \{A^*\} \end{pmatrix} \quad (2.72a)$$

$$R(t) = \begin{pmatrix} \{Q\} & \{P^*\} \\ \{P\} & \{Q^*\} \end{pmatrix}. \quad (2.72b)$$

não é simplética. Outra diferença entre as transformações 2.56b e 2.71b é a presença do termo inhomogêneo $R(t)$, necessário para manter as relações de incerteza.

2.2.3 Fidelidade da evolução

Uma das maneiras de quantificar o efeito do reservatório é através da fidelidade entre o estado que se obteria pela evolução do sistema livre (evolução ideal) e o estado que se obtém através da evolução acoplada com o reservatório. Essa medida tem grande importância na teoria de informação quântica. Diante da impossibilidade de eliminar a interação sistema-reservatório, muitos protocolos foram desenvolvidos para proporcionar ganhos quânticos (processamento de informação de maneira mais eficiente do que o caso clássico), mesmo que a fidelidade não seja um, mas seja suficientemente próxima, dentro das possibilidades experimentais.

A fidelidade é uma medida da superposição entre dois estados; um valor igual a um significa que os estados são puros e iguais, enquanto um valor nulo significa que eles são ortogonais. Em termos dos operadores densidade, ela se expressa de maneira simples

$$F_{12} = \text{Tr}(\rho_1 \rho_2). \quad (2.73)$$

Em termos das funções características, uma expressão igualmente simples pode ser obtida

$$F_{12} = \frac{1}{\pi^N} \int d^{2N} \alpha \chi_1(\{\alpha\}) \chi_2(\{-\alpha\}). \quad (2.74)$$

Podemos usar a solução 2.40 para obter uma expressão para a fidelidade entre dois

mapas de evolução atuando no mesmo estado inicial. Um deles representaria a evolução sem contato com reservatório (com parâmetros $\tilde{\eta}$ e $\tilde{S}$, e $\tilde{R} = 0$), e o outro a evolução com o reservatório (com parâmetros η , S e R). A evolução da fidelidade depende do estado inicial, que vamos tomar como gaussiano nesse caso particular, com parâmetros r e C definidos pelas equações 2.57 e 2.58, e que por suas vezes define:

$$G = SCS^T + \tilde{S}C\tilde{S}^T + R. \quad (2.75)$$

Se G é inversível, a fidelidade é dada por

$$F_{12} = \frac{1}{\sqrt{\det G}} \exp \left(\frac{1}{2} \left(\eta - \tilde{\eta} + (S - \tilde{S})r \right)^T G^{-1} \left(\eta - \tilde{\eta} + (S - \tilde{S})r \right) \right). \quad (2.76)$$

Um caso particular mas de grande interesse é o de mapas que não induzem deslocamento de coordenadas ($\eta = \tilde{\eta} = 0$), com um estado inicial coerente. É possível ver que a fidelidade decai mais rapidamente quanto maior o valor da quadratura do estado coerente.

2.3 Dinâmica não-unitária

As equações 2.71 descrevem um mapa Gaussiano porém não-unitário, que é uma restrição de um mapa unitário definido em um espaço de Hilbert maior (que é o produto tensorial do espaço de Hilbert do sistema com um outro espaço de Hilbert). Essa dinâmica unitária envolve graus de liberdade que não podem ser observados.

No espaço de Hilbert do sistema, essa solução representa a cinemática, isto é, a evolução temporal do estado do sistema sem referência às causas dessa evolução. É conveniente buscar uma descrição dinâmica da evolução não-unitária, que não precise fazer referência a nenhum grau de liberdade além daqueles de interesse. Esse objetivo é alcançado com a generalização da equação de von Neumann para uma equação mestra. Os termos adicionais, que representam o efeito do reservatório, são chamados de Lindbladianos.

Na seção 2.1, partimos de uma equação de von Neumann no espaço de Hilbert com-

binado do sistema com o reservatório (dinâmica microscópica) e obtivemos uma equação diferencial para a função característica; com ela, calculamos a cinemática do sistema. Nessa seção, faremos o caminho contrário. Partimos da solução 2.65, e deduzimos uma equação diferencial a que ela obedece, e consequentemente a equação mestra no espaço de Hilbert do sistema (dinâmica macroscópica).

Por motivos de economia de notação, definimos

$$\beta_k = \begin{cases} \alpha_k & 1 \leq k \leq N \\ \alpha_k^* & N+1 \leq k \leq 2N \end{cases} . \quad (2.77)$$

Similarmente, definimos os operadores

$$A_k = \begin{cases} a_k & 1 \leq k \leq N \\ a_k^\dagger & N+1 \leq k \leq 2N \end{cases} . \quad (2.78)$$

A solução reduzida 2.65 é então escrita como

$$\begin{aligned} \chi_S(\{\beta_k\}, t) = & \exp \left(\sum_{k,j=1}^{2N} \Omega_{k,j} \beta_k \eta_j + \frac{1}{2} \sum_{k,j=1}^{2N} (\Omega R \Omega^T)_{k,j} \beta_k \beta_j \right) \\ & \times \chi_S \left(\left\{ \sum_{j=1}^{2N} (\Omega S \Omega^T)_{k,j} \beta_j \right\}, 0 \right) . \end{aligned} \quad (2.79)$$

Derivando a equação 2.79, obtemos a equação diferencial de primeira ordem:

$$\frac{\partial \chi_S}{\partial t} = \sum_{k,j=1}^{2N} (\Omega F \Omega^T)_{k,j} \beta_j \frac{\partial \chi_S}{\partial \beta_k} + \frac{1}{2} \sum_{k,j=1}^{2N} (\Omega G \Omega^T)_{k,j} \beta_j \beta_k \chi_S + \sum_{k=1}^{2N} (\Omega b)_k \beta_k \chi , \quad (2.80)$$

com

$$F_{k,j} = \sum_{n=1}^{2N} (S^{-1})_{k,n} \frac{dS_{n,j}}{dt} , \quad (2.81a)$$

$$G_{k,j} = \sum_{n=1}^{2N} \left(\frac{dR_{k,j}}{dt} - R_{k,n} F_{n,j} - R_{j,n} F_{n,k} \right) , \quad (2.81b)$$

$$b_k = \frac{d\eta_k}{dt} - \sum_{n=1}^{2N} F_{n,k} \eta_n . \quad (2.81c)$$

Se os mapas de transformação forem inversíveis para todos os tempos (isso é, se $S(t)$ for inversível), eles podem ser escritos como a solução de uma equação diferencial de primeira ordem na representação da função característica.

Para obter a equação mestra, usamos as correspondências

$$\beta_k \rho \rightarrow -[A_k, \rho] \quad (2.82a)$$

$$\frac{\partial \chi}{\partial \beta_k} \rightarrow \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{2N} \Omega_{j,k} \{A_j, \rho\} . \quad (2.82b)$$

Com isso, a equação diferencial 2.80 leva a uma equação mestra na forma de Lindblad,

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H, \rho] + \sum_{k,j=1}^{2N} \Gamma_{k,j} \left(A_j \rho A_k - \frac{1}{2} \{A_k A_j, \rho\} \right) , \quad (2.83)$$

com o Hamiltoniano dado por

$$H = \frac{i}{2} \sum_{k,j,m=1}^{2N} F_{k,m} \Omega_{m,j} A_k A_j - i \sum_{k,j=1}^{2N} \Omega_{k,j} b_j A_k , \quad (2.84)$$

e os termos Lindbladianos dados por

$$\Gamma_{k,j} = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{2N} (F_{k,m} \Omega_{m,j} - F_{j,m} \Omega_{m,k}) - \sum_{m,n=1}^{2N} G_{m,n} \Omega_{k,m} \Omega_{j,n} . \quad (2.85)$$

Em geral, os coeficientes F , G e b serão funções do tempo, de modo que o Hamiltoniano 2.84 e os coeficientes dos termos de Lindblad 2.85 serão também funções do tempo. No caso da dinâmica unitária, temos que $G = 0$ e que S é uma matriz simplética; isso é suficiente para anular os termos Lindbladianos.

2.3.1 Dinâmica de um modo

Nessa seção, apresentamos de forma concisa os resultados por nós obtidos para o caso de um reservatório estruturado, isto é, com um número finito de graus de liberdade.

Mais especificamente, apresentamos aqui a equação mestra que descreve a dinâmica do sistema de interesse, que é a mais geral possível para uma evolução que preserva estados gaussianos.

Verificamos que a cinemática de um único oscilador é descrita por nove parâmetros, quatro que definem a matriz S , três que definem a matriz R (simétrica) e dois que definem termos de deslocamentos:

$$\chi(\alpha, t) = \exp\left(-P|\alpha|^2 + \frac{1}{2}Q\alpha^{*2} + \frac{1}{2}Q^*\alpha^2\right) \chi(A\alpha - B^*\alpha^*, 0) . \quad (2.86)$$

Essa equação é um caso particular da equação 2.65 para um único oscilador. Similarmente, uma equação mestra que descreve a dinâmica desse oscilador deve conter também nove termos. Três deles definem um Hamiltoniano quadrático:

$$H = \omega a^\dagger a + \frac{1}{2}\xi a^{\dagger 2} + \frac{1}{2}\xi^* a^2 . \quad (2.87)$$

Outros dois definem um Hamiltoniano de bombeamento:

$$H_B = \beta a^\dagger + \beta^* a . \quad (2.88)$$

Os demais quatro são termos Lindbladianos

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} = & -i[H, \rho] + (\gamma_1 + \gamma_2) \left(a\rho a^\dagger - \frac{1}{2}\{a^\dagger a, \rho\} \right) + \gamma_2 \left(a^\dagger \rho a - \frac{1}{2}\{aa^\dagger, \rho\} \right) \\ & - \eta \left(a^\dagger \rho a^\dagger - \frac{1}{2}\{a^{\dagger 2}, \rho\} \right) - \eta^* \left(a\rho a - \frac{1}{2}\{a^2, \rho\} \right) . \end{aligned} \quad (2.89)$$

Todos os coeficientes que aparecem na equação mestra podem ser calculados a partir dos coeficientes que definem o mapa:

$$\omega(t) = \frac{1}{|A|^2 - |B|^2} \Im \left(A^* \frac{dA}{dt} - B^* \frac{dB}{dt} \right) \quad (2.90a)$$

$$\gamma_1(t) = \frac{-2}{|A|^2 - |B|^2} \Re \left(A^* \frac{dA}{dt} - B^* \frac{dB}{dt} \right) = -\frac{d}{dt} \log(|A|^2 - |B|^2) \quad (2.90b)$$

$$\xi(t) = \frac{-i}{|A|^2 - |B|^2} \left(A \frac{dB}{dt} - B \frac{dA}{dt} \right) \quad (2.90c)$$

$$\gamma_2(t) = \frac{dP}{dt} + \gamma_1 \left(P - \frac{1}{2} \right) + i\xi Q^* - i\xi^* Q \quad (2.90d)$$

$$\eta(t) = \frac{dQ}{dt} + (\gamma_1 + 2i\omega) Q + 2i\xi P. \quad (2.90e)$$

Dentre esses parâmetros, $(\omega(t), \gamma_1(t) \text{ e } \xi(t))$ dependem apenas da dinâmica homogênea do sistema, ou seja, não dependem do estado inicial do reservatório. Em particular, todos os termos do Hamiltoniano do sistema dependem apenas da topologia do acoplamento entre sistema e reservatório, e os efeitos do estado inicial desse último somente se apresentam nos termos Lindbladianos.

2.3.2 Equação de Fokker-Planck e Langevin

A equação mestra 2.89 pode ser transformada em uma equação diferencial para a função de Wigner, que é a transformada de Fourier da função característica:

$$W(\alpha) = \int \frac{d^2\beta}{\pi^2} \chi(\beta) \exp(\beta^* \alpha - \beta \alpha^*). \quad (2.91)$$

A equação diferencial para a função de Wigner tem a forma da equação de Fokker-Planck:

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial t} = & - \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\left(-\frac{\gamma_1}{2} - i\omega \right) \alpha - i\xi \alpha^* \right) W - \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \left(\left(-\frac{\gamma_1}{2} + i\omega \right) \alpha^* + i\xi^* \alpha \right) W \\ & + \left(\frac{\gamma_1}{2} + \gamma_2 \right) \frac{\partial^2 W}{\partial \alpha \partial \alpha^*} + \frac{1}{2} \eta \frac{\partial^2 W}{\partial \alpha^2} + \frac{1}{2} \eta^* \frac{\partial^2 W}{\partial \alpha^{*2}}. \end{aligned} \quad (2.92)$$

Para comparar com a equação de Langevin clássica, reescrevemos a evolução da função de Wigner em termos das quadraturas reais:

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial t} = & - \frac{\partial}{\partial q} \left(\left(-\frac{\gamma_1}{2} + \Im(\xi) \right) q + (\omega - \Re(\xi)) p \right) \\ & - \frac{\partial}{\partial p} \left(\left(-\frac{\gamma_1}{2} - \Im(\xi) \right) p - (\omega + \Re(\xi)) q \right) \\ & + \left(\frac{\gamma_1}{2} + \gamma_2 + \frac{\Re(\eta)}{2} \right) \frac{\partial^2 W}{\partial q^2} + \left(\frac{\gamma_1}{2} + \gamma_2 - \frac{\Re(\eta)}{2} \right) \frac{\partial^2 W}{\partial p^2} + \Im(\eta) \frac{\partial^2 W}{\partial q \partial p}. \end{aligned} \quad (2.93)$$

Essa equação de Fokker-Planck tem uma forma particular, pois os vetores de deslocamento (drift) são proporcionais às coordenadas, enquanto a matriz de difusão é independente das

coordenadas:

$$\begin{pmatrix} \mu_q(t) \\ \mu_p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\gamma_1}{2} + \Im(\xi) & \omega - \Re(\xi) \\ -\omega - \Re(\xi) & -\frac{\gamma_1}{2} - \Im(\xi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad (2.94)$$

$$\begin{pmatrix} D_{qq}(t) & D_{qp}(t) \\ D_{pq}(t) & D_{pp}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma_2 + \frac{1}{2}\gamma_1 + \frac{1}{2}\Re(\eta) & \frac{1}{2}\Im(\eta) \\ \frac{1}{2}\Im(\eta) & \gamma_2 + \frac{1}{2}\gamma_1 - \frac{1}{2}\Re(\eta) \end{pmatrix}. \quad (2.95)$$

Isso caracteriza um processo de Ornstein-Uhlenbeck, que pode ser descrito também por uma equação de Langevin clássica e dependente do tempo. Para obtê-la, primeiramente precisamos achar uma matriz B tal que $BB^T = D$; os coeficientes dessa matriz serão os fatores que multiplicam os termos estocásticos. Após esse passo, temos o sistema:

$$\frac{dq}{dt} = \left(-\frac{\gamma_1}{2} + \Im(\xi)\right) q + (\omega - \Re(\xi)) p + B_{11}\epsilon_1(t) + B_{12}\epsilon_2(t) \quad (2.96a)$$

$$\frac{dp}{dt} = -(\omega + \Re(\xi)) q + \left(-\frac{\gamma_1}{2} - \Im(\xi)\right) p + B_{21}\epsilon_1(t) + B_{22}\epsilon_2(t). \quad (2.96b)$$

Os termos estocásticos $\epsilon_{1,2}(t)$ obedecem a uma correlação clássica:

$$\langle \epsilon_k(t_1) \epsilon(t_2) \rangle = \delta_{k,j} \delta(t_1 - t_2). \quad (2.97)$$

Em contraste com o procedimento de Koch,⁸ mostramos que a dinâmica quântica linear pode ser simulada no espaço de fase da Mecânica Clássica por meio de um processo de Langevin clássico, com coeficientes dependentes do tempo, e correlações instantâneas dos termos estocásticos. Nesse sentido, fica difícil apontar o caráter quântico da evolução; um ponto em que a assinatura quântica aparece decorre de um reservatório a baixas temperaturas, caso no qual o coeficiente γ_1 não vai a zero, como ocorre no caso clássico. As flutuações de ponto zero do reservatório continuam inserindo ruído no sistema. Porém, para um reservatório de temperatura elevada, a dinâmica quântica é bastante similar à clássica.

2.4 Variáveis discretas

As seções anteriores foram dedicadas ao comportamento de um conjunto de osciladores harmônicos quando em contato com um reservatório estruturado formado por outros osciladores harmônicos. No entanto, uma extensão relativamente simples do método permite tratar sistemas de variáveis discretas, cujo espaço de Hilbert é finito, acoplados com o mesmo reservatório estruturado. Uma vantagem que isso proporciona é que, em um caso específico, porém de grande interesse, é possível calcular analiticamente os parâmetros de uma equação mestra a que o sistema discreto está sujeito, e com isso investigar as condições que devem ser impostas sobre o reservatório para que os comportamentos normalmente observados sejam recuperados.

Uma das essências do método proposto é o uso da função característica, em substituição ao espaço de Hilbert dos osciladores. Continuamos com essa proposta, definindo uma função característica por meio de um traço parcial apenas sobre os osciladores. Dessa forma, a função característica é na verdade uma matriz no espaço de Hilbert finito do sistema discreto:

$$\hat{\chi}(\{\alpha_k\}, t) = Tr_R \left(\exp \left(\sum_{k=1}^N (\alpha_k a_k^\dagger - \alpha_k^* a_k) \right) \rho \right) . \quad (2.98)$$

Uma forma geral para o Hamiltoniano que pretendemos tratar é

$$H = H_S + \sum_{k=1}^N \omega_k a_k^\dagger a_k + V \otimes \sum_{k=1}^N g_k a_k^\dagger + V^\dagger \otimes \sum_{k=1}^N g_k^* a_k , \quad (2.99)$$

onde H_S e V são operadores no espaço de Hilbert do sistema de variáveis discretas. O estado reduzido do sistema, que é frequentemente toda a informação acessível experimentalmente, é igual à função característica avaliada na origem do espaço de fase:

$$\rho_S(t) = \hat{\chi}(\{0\}, t) . \quad (2.100)$$

Sendo um operador, a função característica obedece a uma equação diferencial de

operadores:

$$i\frac{\partial \hat{\chi}}{\partial t} = [H_S, \hat{\chi}] + \sum_k \omega_k \left(\alpha_k^* \frac{\partial \hat{\chi}}{\partial \alpha_k^*} - \alpha_k \frac{\partial \hat{\chi}}{\partial \alpha_k} \right) + \sum_k g_k \left(\left[V, \frac{\partial \hat{\chi}}{\partial \alpha_k^*} \right] - \frac{1}{2} \alpha_k^* \{V, \hat{\chi}\} \right) + \sum_k g_k^* \left(\left[\frac{\partial \hat{\chi}}{\partial \alpha_k}, V^\dagger \right] - \frac{1}{2} \alpha_k \{V, \hat{\chi}\} \right) . \quad (2.101)$$

Existe um caso em que a equação 2.101 admite uma solução exata e simples, que é o chamado banho de fase⁴² de um sistema de dois níveis. A ação do reservatório nesse caso é a de introduzir fases relativas entre os estados que compõe a superposição, destruindo a sua coerência. O Hamiltoniano desse processo é

$$H = \frac{1}{2} \omega_0 \sigma_z + \sum_{k=1}^N \omega_k a_k^\dagger a_k + \sigma_z \otimes \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N g_k (a_k^\dagger + a_k) . \quad (2.102)$$

Ele tem a forma 2.99, com

$$H_S = \frac{1}{2} \omega_0 \sigma_z , \quad (2.103)$$

$$V = V^\dagger = \frac{1}{2} \sigma_z . \quad (2.104)$$

Esse Hamiltoniano comuta com o operador σ_z , de modo que os elementos diagonais do operador densidade reduzido do sistema são constantes. Precisamos portanto nos focar apenas nos elementos fora da diagonal. Escrevemos então a equação 2.101 para o elemento de matriz χ_{12} :

$$i\frac{\partial \chi_{12}}{\partial t} = \omega_0 \chi_{12} + \sum_{k=1}^N \omega_k \left(\alpha_k^* \frac{\partial \chi_{12}}{\partial \alpha_k^*} - \alpha_k \frac{\partial \chi_{12}}{\partial \alpha_k} \right) + \sum_{k=1}^N \left(g_k \frac{\partial \chi_{12}}{\partial \alpha_k^*} - g_k^* \frac{\partial \chi_{12}}{\partial \alpha_k} \right) . \quad (2.105)$$

Essa equação não depende dos demais elementos de matriz, e pode ser resolvida pelo mesmo ansatz 2.40. A solução é de fato muito simples:

$$\chi_{12}(\{\alpha_k\}, t) = e^{-i\omega_0 t} \chi_{12} \left(\left\{ \frac{g_k^*}{\omega_k} (1 - e^{i\omega_k t}) \right\}, 0 \right) . \quad (2.106)$$

A função $\chi_{12}(\{\alpha_k^*\}, \{\alpha_k\}, 0)$ pode ser calculada diretamente a partir da equação 2.98, para qualquer forma do estado inicial. No entanto, usualmente é feita a hipótese de que

o estado inicial é um estado produto entre o sistema e o reservatório:

$$\chi_{12}(\{\alpha_k\}, 0) = \rho_{12}(0) \chi_R(\{\alpha_k\}) . \quad (2.107)$$

Ao calcular essa função característica na origem, obtemos o mapa de evolução do estado do sistema de dois níveis:

$$\rho_S(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(0) & \rho_{12}(0) F(t) \\ \rho_{21}(0) F^*(t) & \rho_{22}(0) \end{pmatrix} , \quad (2.108)$$

com

$$F(t) = \chi_R \left(\left\{ \frac{g_k^*}{\omega_k} (1 - e^{i\omega_k t}) \right\} \right) \quad (2.109)$$

A função característica do reservatório ainda é dada pela equação 2.64. Um caso de particular interesse é o de um reservatório térmico, com número médio ν_k de excitações em cada modo:

$$F(t) = \exp \left(- \sum_{k=1}^N \left(\nu_k + \frac{1}{2} \right) \frac{4|g_k|^2}{\omega_k^2} \sin^2 \left(\frac{\omega_k t}{2} \right) \right) . \quad (2.110)$$

Seguindo a idéia da seção 2.3, derivamos o mapa 2.108 no tempo e notamos que

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -i \frac{\omega_0}{2} [\sigma_z, \rho_S(t)] - \frac{1}{2F(t)} \frac{dF}{dt} (\sigma_z \rho_S(t) \sigma_z - \rho_S(t)) . \quad (2.111)$$

A evolução 2.108 é a solução de uma dinâmica Liouvillianiana escrita inteiramente em termos dos operadores do sistema de interesse, sem qualquer referências a graus de liberdade adicionais. Os termos não-unitários tem a estrutura de Lindblad, com o operador σ_z representando o processo de fase. A taxa de decaimento, no entanto, é na verdade uma função do tempo.

$$\gamma(t) = \frac{-1}{F(t)} \frac{dF}{dt} = \sum_{k=1}^N \left(\nu_k + \frac{1}{2} \right) \frac{2|g_k|^2}{\omega_k} \sin(\omega_k t) . \quad (2.112)$$

Essa solução exata depende de um modelo para a distribuição de frequências e aco-

plamentos do reservatório. Definimos a função espectral

$$J(\omega) = \sum_{k=1}^N |g_k|^2 \delta(\omega - \omega_k) , \quad (2.113)$$

e em termos dessa, podemos escrever

$$\gamma(t) = \int_0^\infty d\omega \frac{\sin(\omega t)}{\omega} J(\omega) (1 + 2\nu(\omega)) . \quad (2.114)$$

O comportamento do decaimento de fase é relacionado à transformada de Fourier de $J(\omega) (1 + 2\nu(\omega))$. A observação experimental da curva de decaimento de fase permite inferir a distribuição espectral $J(\omega)$; em outras palavras, o sistema de dois níveis atua como um espectrômetro de ruído.

CAPÍTULO 3

O LIMITE DO RESERVATÓRIO CONTÍNUO

Nesse capítulo, devemos considerar o caso limite de um reservatório contínuo. Para tal, iremos considerar uma topologia estrela, em que o sistema interage com os modos normais do reservatório tratado no capítulo anterior.

3.1 Dinâmica de um modo

Consideramos o caso de um único modo ($N_S = 1$) cuja energia decai devido à interação com um reservatório. De acordo com o programa de Caldeira-Legget,⁴³ buscamos inicialmente obter as condições para que a dinâmica quântica reproduza a equação clássica de movimento. Podemos, no entanto, citar uma diferença entre o nosso método e o de Caldeira-Legget: o nosso desenvolvimento envolve apenas a resolução de sistemas lineares, mais simples que aquelas decorrentes das integrais de Feynman, e mais adequada para simulações computacionais. A partir dos desenvolvimentos do capítulo anterior, devemos agora focar na interação do sistema de interesse com os modos normais do reservatório, que por definição não interagem entre si, levando à topologia mostrada na figura 3.1.

Figura 3.1 – Topologia de uma rede de osciladores na configuração central, ou estrela, correspondente ao Hamiltoniano 3.1. Figura extraída de,¹ com permissão do autor.

3.1.1 Acoplamento de coordenadas

Nesse contexto em que o modo de interesse (com índice 1) interage com os modos normais do reservatório (com índices 2 a N), o Hamiltoniano é similar ao da equação 2.1:

$$H = \sum_{k=1}^N \left(\frac{1}{m_k} \hat{p}_k^2 + \nu_k^2 \hat{q}_k^2 \right) + \frac{1}{4} \sum_{k=2}^N C_k (\hat{q}_1 - \hat{q}_k)^2 . \quad (3.1)$$

As definições 2.4 e 2.7 se tornam nesse caso

$$\omega_1 = \sqrt{\varpi_1^2 + \frac{1}{m_1} \sum_{k=2}^N C_k} , \quad (3.2)$$

$$\omega_k = \sqrt{\varpi_k^2 + \frac{C_k}{m_k}} \quad (k \neq 1) , \quad (3.3)$$

$$g_k = \frac{C_k}{2\sqrt{m_1\omega_1 m_k\omega_k}} \quad (k \neq 1) . \quad (3.4)$$

Com isso, podemos escrever o Hamiltoniano em termos dos operadores de criação e

destruição definidos em 2.5:

$$H = \sum_{k=1}^N \omega_k a_k^\dagger a_k - \left(a_1 + a_1^\dagger \right) \sum_{k=2}^N g_k \left(a_k + a_k^\dagger \right) . \quad (3.5)$$

Na seção 2.1, foram definidas as matrizes G e F , que nesse contexto assumem a forma:

$$G = \begin{pmatrix} \omega_1 & -g_2 & \dots & -g_N \\ -g_2 & \omega_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -g_N & 0 & \dots & \omega_N \end{pmatrix} , \quad (3.6)$$

$$F = \begin{pmatrix} 0 & -g_2 & \dots & -g_N \\ -g_2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -g_N & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} . \quad (3.7)$$

O método por nós proposto para a obtenção da dinâmica da rede consiste em resolver as equações 2.48 apenas para $n = 1$, caso em que temos o sistema de equações acopladas:

$$\frac{d}{dt} U_{1,1} = i\omega_1 U_{1,1} - i \sum_{j=2}^N g_j (U_{1,j} - V_{1,j}) , \quad (3.8a)$$

$$\frac{d}{dt} V_{1,1} = -i\omega_1 V_{1,1} - i \sum_{j=2}^N g_j (U_{1,j} - V_{1,j}) , \quad (3.8b)$$

$$\frac{d}{dt} U_{1,k} = i\omega_k U_{1,k} - ig_k (U_{1,1} - V_{1,1}) , \quad (3.8c)$$

$$\frac{d}{dt} V_{1,k} = -i\omega_k V_{1,k} - ig_k (U_{1,1} - V_{1,1}) . \quad (3.8d)$$

Com a notação $A \equiv U_{1,1}$ e $B \equiv V_{1,1}$, o mapa de transformação $S(t)$ definido em 2.72 é obtido diretamente dessa solução, tal que

$$S(t) = \begin{pmatrix} A & B^* \\ B & A^* \end{pmatrix} . \quad (3.9)$$

Os termos inhomogêneos $R(t)$ e $g(t)$ dependem do estado inicial do reservatório, e serão analisados separadamente.

As equações 3.8c e 3.8d podem ser resolvidas tomando $A \equiv U_{1,1}$ e $B \equiv V_{1,1}$ como parâmetros externos:

$$U_{1,k}(t) = -ig_k \int_0^t dt_1 e^{i\omega_k(t-t_1)} (A(t_1) - B(t_1)) , \quad (3.10a)$$

$$V_{1,k}(t) = -ig_k \int_0^t dt_1 e^{-i\omega_k(t-t_1)} (A(t_1) - B(t_1)) . \quad (3.10b)$$

Substituindo esses valores de volta nas equações 3.8a e 3.8b, obtemos um sistema de equações integro-diferenciais

$$\frac{d}{dt}A = i\omega_1 A - 2i \sum_{k=2}^N g_k^2 \int_0^t dt_1 \sin(\omega_k(t-t_1)) (A(t_1) - B(t_1)) , \quad (3.11a)$$

$$\frac{d}{dt}B = -i\omega_1 B - 2i \sum_{k=2}^N g_k^2 \int_0^t dt_1 \sin(\omega_k(t-t_1)) (A(t_1) - B(t_1)) , \quad (3.11b)$$

no qual a influência do reservatório é completamente representada pela função:

$$h(t) = \sum_{k=2}^N g_k^2 \sin(\omega_k t) . \quad (3.12)$$

A densidade espectral do ruído é normalmente definida⁹ como

$$J(\omega) = \frac{\omega_1}{\sum_{j=2}^N C_j} \sum_{k=2}^N C_k^2 \delta(\omega - \omega_k) , \quad (3.13)$$

e em termos dela, a função de correlação é dada por

$$h(t) = \int_0^\infty J(\omega) \frac{\sin(\omega t)}{\omega} d\omega . \quad (3.14)$$

Além de A e B , a evolução ainda depende dos parâmetros P e Q (equações 2.68 e 2.69), que são não-nulos mesmo para um reservatório a temperatura zero. Uma análise conveniente é separá-los em termos de temperatura zero,

$$P_0(t) = \frac{1}{2} \sum_{k=2}^N (|U_{1,k}|^2 + |V_{1,k}|^2) , \quad (3.15)$$

$$Q_0(t) = \sum_{k=2}^N U_{1,k}^* V_{1,k}^* , \quad (3.16)$$

e termos que contenham os efeitos do estado inicial do reservatório. Em especial, para um reservatório térmico em que $\langle a_k^\dagger a_j \rangle = \nu_k \delta_{k,j}$, temos

$$P_T(t) = \sum_{k=2}^N \nu_k (|U_{1,k}|^2 + |V_{1,k}|^2) , \quad (3.17)$$

$$Q_T(t) = 2 \sum_{k=2}^N \nu_k U_{1,k}^* V_{1,k}^* . \quad (3.18)$$

3.1.2 Aproximação de ondas girantes

O resultado obtido (equação 3.11) pode ser comparado com aquele da aproximação de ondas girantes. A condição $F = 0$ imediatamente implica em $V = 0$, e as equações 3.8 são simplificadas, tal que

$$\frac{d}{dt} U_{1,1} = i\omega_1 U_{1,1} - i \sum_{j=2}^N g_j U_{1,j} \quad (3.19a)$$

$$\frac{d}{dt} U_{1,k} = i\omega_k U_{1,k} - ig_k U_{1,1} \quad (3.19b)$$

Uma solução formal pode ser obtida da mesma maneira utilizada na subseção anterior, do que decorre:

$$U_{1,k}(t) = -ig_k \int_0^t dt_1 e^{i\omega_k(t-t_1)} A_{OG}(t_1) , \quad (3.20)$$

$$\frac{d}{dt} A_{OG} = i\omega_1 A_{OG} - \sum_{k=2}^N g_k^2 \int_0^t dt_1 e^{i\omega_k(t-t_1)} A_{OG}(t_1) , \quad (3.21)$$

onde a influência do reservatório está contida na função:

$$h_{OG}(t) = \sum_{k=2}^N g_k^2 e^{i\omega_k t} , \quad (3.22)$$

cujas partes imaginária coincide com a função de correlação 3.12.

3.2 Limite do contínuo

Vimos que o efeito do reservatório sobre os parâmetros A e B é completamente definido pela função de correlação do reservatório 3.12. O limite de um reservatório contínuo, formado por uma infinidade de modos, consiste em tomar uma forma específica para essa função de correlação, e utilizá-la no sistema de equações integro-diferenciais 3.11, que pode ser então resolvido por uma transformada de Fourier:

$$A(t) = \mathcal{F}^{-1} \left(\frac{i(\omega + \omega_1 - 2H(\omega))}{\omega_1^2 - \omega^2 - 4\omega_1 H(\omega)} \right) \quad (3.23a)$$

$$B(t) = \mathcal{F}^{-1} \left(\frac{-2iH(\omega)}{\omega_1^2 - \omega^2 - 4\omega_1 H(\omega)} \right), \quad (3.23b)$$

, onde $H(\omega)$ é a transformada de Fourier de 3.12:

$$H(\omega) = -i\frac{\pi}{2} \frac{J(\omega)}{\omega} \text{sign}(\omega), \quad (3.24)$$

com $\text{sign}(\omega) = 1$ se $\Re(\omega) > 0$ e $\text{sign}(\omega) = -1$ se $\Re(\omega) < 0$.

Notamos que com as funções $A(t)$ e $B(t)$ definidas nas equações 3.23, a equação mestra 2.89 fica parcialmente definida no limite do contínuo. Especificamente, as funções $\omega(t)$, $\xi(t)$ e $\gamma_1(t)$ são completamente determinadas por A e B . Contudo, ainda resta determinar as funções $\gamma_2(t)$ e $\eta(t)$, o que demanda o conhecimento do estado inicial do reservatório. Para calculá-la, substituímos os valores de A e B na equação 3.10, e usamos os valores $U_{1,k}$ e $V_{1,k}$ assim obtidos nas equações de 3.15 a 3.18, para as quais assumimos que o reservatório encontra-se em um estado térmico. De posse das funções P e Q assim obtidas, usamos por fim as equações 2.90d e 2.90e para a obtenção das funções requeridas para completar a equação mestra no limite do contínuo.

No limite de acoplamento fraco, apenas os modos normais do reservatório com frequências próximas à do sistema de interesse é que desempenham papel relevante. Assim, podemos substituir a função $H(\omega)$ nas equações 3.23 pelo seu valor na frequência do sistema ω_1 :

$$H(\omega_1) = -i\frac{\pi}{2} \frac{J(\omega_1)}{\omega_1}, \quad (3.25)$$

Esses resultados implicam em um decaimento exponencial para os módulos $|A(t)|$ e $|B(t)|$, e conseqüentemente, a um valor constante para a taxa de decaimento $\gamma_1(t)$:

$$\gamma_1(t) = 4iH(\omega_1) \quad (3.26)$$

CAPÍTULO 4

SIMULAÇÃO EFICIENTE DE UM RESERVATÓRIO ESTRUTURADO

Os capítulos anteriores foram dedicados à proposição de um método de resolução da dinâmica de uma rede de osciladores com um particular interesse no problema da dinâmica sistema-reservatório, que exploraremos em mais detalhe neste capítulo. Em especial, devemos estudar o decaimento de um modo do oscilador harmônico acoplado a um reservatório estruturado. Ao explorar o caráter linear da dinâmica, conseguimos com que essa seja descrita por uma equação vetorial, cujos recursos computacionais necessários escalam polinomialmente, ao invés de exponencialmente como ocorreria com a dinâmica completamente quântica no espaço de Hilbert. Na linguagem computacional, um problema de complexidade polinomial é dito ser eficiente.

4.1 Grandezas relevantes

A primeira grandeza relevante de um oscilador é o valor médio de sua quadratura. A aproximação de ondas girantes trata ambas as quadraturas de maneira igual, enquanto o acoplamento por posição, por definição, trata de modo desigual a quadratura de posição (parte real de a) e de momento (parte imaginária de a). Em termos das quadraturas reais, podemos definir as matrizes de transformação (compare com a equação 2.72a, escrita em

termos de amplitudes complexas).

$$S = \begin{pmatrix} \Re(A+B) & -\Im(A+B) \\ \Im(A-B) & \Re(A-B) \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

$$S_{OG} = \begin{pmatrix} \Re(A_{OG}) & -\Im(A_{OG}) \\ \Im(A_{OG}) & \Re(A_{OG}) \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Esses parâmetros medem a persistência de uma excitação inicial. Os parâmetros P e Q , por sua vez, medem o estado final, ou seja, o estado para o qual o reservatório leva o sistema assintoticamente. No caso de um reservatório térmico (embora o nosso método possa ser facilmente estendido a outros estados do reservatório, focaremos nossa atenção especialmente nos estados térmicos), esse estado é (próximo de) um estado térmico, caracterizando um equilíbrio térmico; o processo de buscar o equilíbrio térmico é chamado de termalização.

4.2 Acoplamento fraco

Começamos por investigar como o nosso modelo pode simular o decaimento exponencial das quadraturas (observável experimentalmente em vários sistemas). Fazemos isso construindo um modelo de um reservatório estruturado, e resolvendo numericamente as equações 3.8 com uma dada distribuição de frequências dos modos do reservatório e de acoplamentos desses com o sistema. Repetimos o processo dentro da aproximação de ondas girantes. Após isso, apresentamos as matrizes de transformação S e S_{OG} (equações 4.1 e 4.2).

As aproximações que são feitas na dedução das equações mestras usuais (conforme apêndice B) são baseadas no regime de acoplamento fraco entre sistema e reservatório. Especificamente, a equação mestra é expandida até segunda ordem em um parâmetro que define a intensidade do acoplamento, e o efeito do sistema sobre o reservatório é desprezado (aproximação de Born). As equações 3.8 não sofrem desses problemas, pois representam a dinâmica exata do universo (sistema e reservatório).

Nas simulações realizadas neste capítulo, escalamos os valores de frequência em termos de ω_1 , e os valores de tempo em termos de ω_1^{-1} , e definimos um reservatório estruturado com $N = 1000$. Para simular o acoplamento fraco, tomamos o valor de g_k como $\omega_1/100$. Em muitos sistemas físicos, os acoplamentos são várias ordens de grandeza menores do que ω_1 , porém esse valor ainda é suficiente para mostrar os principais fenômenos do regime de acoplamento fraco. As frequências dos osciladores do reservatório formam uma ampla distribuição ao redor de ω_1 .

4.2.1 Quadraturas

Dito isso, mostramos na figura 4.1 os elementos de matriz de S e S_{OG} (ver equações 4.1 e 4.2). Como a evolução do sistema sem o acoplamento com o reservatório seria simplesmente a evolução livre com frequência ω_1 , mudamos para um referencial girante com essa frequência (representação de interação), de modo que todas as mudanças observadas no estado podem ser diretamente atribuídas à interação com o reservatório. As três curvas que se iniciam em 1 são os elementos diagonais de S e S_{OG} , enquanto as três curvas que partem de 0 são as quadraturas ortogonais. As curvas cheias representam um estado que foi inicialmente preparado com um deslocamento na quadratura de momento, isto é, com $\langle a \rangle_o = ip_o$; a curva superior dá a evolução dessa quadratura, e a curva inferior é a evolução da quadratura ortogonal (de posição). Na linha tracejada, os papéis se invertem entre posição e momento (apenas com relação ao estado inicial; o acoplamento continua sendo entre posições). Finalmente, as linhas pontilhadas representam a evolução dentro da aproximação de ondas girantes, caso em que as quadraturas são análogas. Para visualizar o comportamento exponencial, mostramos novamente os elementos diagonais em escala logarítmica na figura 4.2.

Na aproximação de ondas girantes, observamos que o decaimento é exponencial e monotônico. Os termos contra-girantes, entretanto, alteram essa última característica, e provocam pequenas oscilações ao redor de um processo que, na média, é bastante próximo de um decaimento exponencial. Essas oscilações são tanto mais intensas quanto maior for o acoplamento, e devem ser desprezíveis no limite de um acoplamento realmente fraco.

Figura 4.1 – Elementos de matriz de S e S_{OG} , representando o decaimento das quadraturas. Em linha cheia, os elementos $S_{2,2}$ e $S_{2,1}$, representando um estado inicial deslocado na quadratura de momento. Em linha tracejada, os elementos $S_{1,1}$ e $-S_{1,2}$, representando um estado inicial deslocado na quadratura de posição. Em linha pontilhada, o quadratura inicial e a quadratura ortogonal na aproximação de ondas girantes

Figura 4.2 – Elementos diagonais de S e S_{OG} , em escala logarítmica. Similar à figura 4.1

Outra maneira de visualizar o comportamento exponencial é através de uma transformada de Fourier da evolução da quadratura,

$$F(\omega) = \int_0^\infty dt e^{-i\omega t} \langle a \rangle_t. \quad (4.3)$$

Na figura 4.3, plotamos a amplitude $|F(\omega)|$ para os três casos discutidos acima. Notamos que, em todos esses casos, o espectro tem uma forma Lorentziana, característica do decaimento exponencial; a largura dessa lorentziana é a constante de decaimento γ_o , que tem um valor compatível com aqueles obtidos pelo ajuste direto da figura 4.2.

Em seguida, utilizamos a equação 2.90b para obter a taxa de decaimento $\gamma_1(t)$ que

Figura 4.3 – Espectro de Fourier dos elementos diagonais de S e S_{OG} , com ajuste Lorentziano. A largura de cada ajuste é indicada.

multiplica um termo Lindbladiano na equação mestra. A figura 4.4 mostra esse resultado, e um importante fato, relativo ao comportamento da equação mestra em tempos muito curtos. Enquanto as aproximações de acoplamentos fraco e súbito para um reservatório contínuo implicam em um valor constante para a taxa de decaimento, vemos que o que ocorre de fato é que essa taxa evolui para um valor constante em uma escala de tempo, da ordem do inverso da frequência de corte, que pode ser bem curta com relação ao tempo de relaxação do sistema. Note que não estamos realizando a aproximação Markoviana, a qual elimina a necessidade de impor uma frequência de corte para o reservatório.

Na figura 4.5, passamos à análise do comportamento em tempos curtos do decaimento das quadraturas. De acordo com a equação integro-diferencial 3.11, a derivada de A e B é nula no instante inicial, de modo que o comportamento desses quadraturas deve ser no máximo quadrático, diferentemente do comportamento linear que se espera de um decaimento exponencial. A figura 4.5 mostra um detalhe da figura 4.1, a partir do qual se infere o comportamento quadrático em tempos curtos. Como esse decaimento é lento, o ajuste que se faz assumindo decaimento exponencial acaba por superestimar de forma sutil o valor inicial da quadratura. Esse efeito é exacerbado pelos termos contra-girantes.

Figura 4.4 – Taxa de decaimento variável no tempo. A taxa varia de forma linear em tempos curtos, mas atinge um valor constante, e é consistente com os ajustes mostrados nas figuras 4.2 e 4.3.

Figura 4.5 – Detalhe da evolução das quadraturas em tempos curtos.

4.2.2 Forma espectral do ruído

O trabalho de Caldeira-Legget⁹ foi o primeiro a demonstrar que o ruído ôhmico (para o qual $J(\omega) \propto \omega^{43}$) é necessário para obter a equação de Langevin no limite clássico, que por sua vez implica no decaimento exponencial. Na figura 4.6, mostramos o decaimento da quadratura, dentro da aproximação de ondas girantes, para três formas de ruído: o ôhmico, o ruído branco (caracterizado por $J(\omega)$ constante), e um ruído com contribuição de ambas as formas ($J(\omega) = a + b\omega$). Na frequência do sistema ($\omega_1 = 1$), todos tem o mesmo valor de densidade espectral; de acordo com a Regra de Ouro de Fermi e a derivação da equação mestra apresentada no apêndice B, a dinâmica deveria ser igual em

todos os casos. Notamos que de fato há a tendência de decaimento, com a mesma taxa em média; entretanto, o decaimento só é suave para o ruído ôhmico, exibindo pequenas oscilações nos demais casos.

Figura 4.6 – Evolução da quadratura inicial no referencial girante, com a aproximação de ondas girantes, para diferentes formas de ruído. No inset, as densidades espectrais de acordo com a equação 3.13

4.2.3 Termalização

Investigaremos agora o processo de termalização, que no mapa de evolução é representado pelos parâmetros P e Q . O estado assintótico é um estado gaussiano, caracterizado pelos valores assintóticos de P e Q .

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle a^\dagger a \rangle_t + \frac{1}{2} = \lim_{t \rightarrow \infty} P(t) \quad (4.4a)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle a^2 \rangle_t = \lim_{t \rightarrow \infty} Q(t) \quad (4.4b)$$

Caso $\langle a^2 \rangle_t = 0$, esse estado assintótico é uma distribuição térmica ($\rho \propto e^{-\beta \omega_1 a^\dagger a}$). Isso sempre ocorre na aproximação de ondas girantes, porém a situação é diferente para o acoplamento entre coordenadas, como pode ser visto nas figuras 4.7 e 4.8. A primeira representa uma situação de alta temperatura ($T = 1000$), enquanto a segunda representa um reservatório a temperatura zero. Não há uma diferença qualitativa entre as curvas, apenas as suas escalas.

Figura 4.7 – Parâmetros P e Q do mapa de evolução para um reservatório térmico a temperatura alta

Figura 4.8 – Parâmetros P e Q do mapa de evolução para um reservatório térmico a temperatura zero

A termalização afeta a energia média do oscilador. Na figura 4.9, mostramos a evolução da energia para um estado inicial coerente com $|\alpha| = 7$. A escala de tempo que o sistema leva para atingir o valor assintótico da energia é maior do que a escala de tempo do decaimento das quadraturas. Em outras palavras, os momentos de segunda ordem evoluem de forma mais lenta do que os de primeira.

Outro importante efeito da temperatura é na perda de pureza (definida aqui como $\text{Tr}(\rho^2)$) do estado inicial, sendo esse um fenômeno em que os termos contra-girantes tem um papel fundamental. É um resultado conhecido³⁹ que, em um reservatório a temperatura zero na aproximação de ondas girantes, um estado inicial coerente permanece coerente, apenas espiralando em direção à origem do espaço de fase; o estado permanece puro mesmo estando submetido a uma evolução não-unitária. Isso deixa de ser verdade com a inclusão dos termos contra-girantes. A figura 4.10 mostra a evolução da pureza para um reservatório a temperatura zero e diferentes intensidades de acoplamento, em um regime que já podemos considerar de acoplamento forte. Observamos um comportamento transiente, seguido de uma estabilização em um valor diferente de 1, e que é tanto mais

Figura 4.9 – Evolução da energia média do oscilador para um estado inicial com $|\alpha| = 7$

baixo quanto maior for a intensidade de acoplamento.

Figura 4.10 – Evolução da pureza de um estado inicial coerente, para diferentes intensidades de acoplamento

4.3 Comportamento não-Markoviano

Após considerar o limite de acoplamento fraco, iremos considerar uma situação de acoplamento forte, em busca de observar comportamentos diferentes. O primeiro ponto a ser notado é com relação ao significado de acoplamento fraco quando se é tomado o limite de muitos osciladores no reservatório, de modo que os acoplamentos C_k são substituídos por uma densidade espectral $J(\omega)$. Essa função tem uma largura típica (que não pode

ser infinita, como um ruído branco, pois a energia contida no ruído deve ser finita) e um valor absoluto típico, que mede a intensidade do acoplamento. Ambos os parâmetros têm dimensão de frequência, e podem ser diretamente comparados, e a razão entre o valor típico de $J(\omega)$ e a sua largura é o que permite diferenciar o acoplamento fraco e forte. A maneira mais simples de modelar então o comportamento não-Markoviano é através de um reservatório cuja largura da densidade espectral seja comparável à sua amplitude. Utilizamos uma forma Lorentziana:⁴⁴

$$J(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\gamma_o \lambda^2}{(\omega - \omega_o)^2 + \lambda^2} . \quad (4.5)$$

A largura típica dessa função é λ e o seu valor típico (ao redor de ω_o) é γ_o . Se $\lambda \approx \gamma_o$, temos uma situação de acoplamento forte.

Simulamos um reservatório com essa densidade espectral. Mostramos nas figuras 4.11 e 4.12 a evolução da energia de um estado inicial coerente para três tipos de ruído, cujos espectros estão mostrados no detalhe. A primeira inclui os termos contra-girantes, enquanto na segunda é assumida a aproximação de ondas girantes. As curvas em linhas pontilhadas representam um reservatório de banda relativamente larga, isto é, com $\lambda \gg \gamma_o$, enquanto a linha cheia representa um reservatório de banda curta, com $\lambda < \gamma_o$.

Observando os dois gráficos, vemos que os termos contra-girantes não alteram fundamentalmente o comportamento mas apenas introduzem pequenas oscilações ao redor da tendência média. Isso não deixa de ser inesperado, pois a aproximação de ondas girantes deveria falhar nesse caso de acoplamento forte, e no entanto ela parece ainda capaz de capturar a física essencial.

Analisando a figura 4.12, vemos que até $t \approx 10$, todas as três curvas são similares, e que nessa escala de tempo o valor inicial da quadratura já decaiu a um valor próximo de zero (de fato, um ajuste da curva pontilhada fornece uma taxa de decaimento de $\gamma_{aj} \approx 1/9.7$). No entanto, esse decaimento somente é irreversível para as curvas pontilhadas. O reservatório de banda curta, após drenar a quadratura do sistema, começa a realimentá-la, e esse processo de troca de energia entre o sistema e o reservatório continua por alguns ciclos (podemos conjecturar, baseado nesses resultados, que a escala de tempo desse processo é da ordem do tempo de correlação do reservatório).

Figura 4.11 – Evolução da energia média para reservatórios Lorentzianos a temperatura zero. As curvas pontilhadas apresentam comportamento Markoviano, enquanto a curva cheia apresenta um comportamento não-Markoviano

Chegamos assim a uma característica fundamental que um reservatório deve possuir para que o fluxo de energia seja unidirecional, que é uma larga banda de frequências. Fisicamente, a interação entre cada modo do reservatório com o sistema é coerente e provocaria uma troca de energia entre eles. Entretanto, a alimentação do sistema pelo reservatório depende da interferência entre todas essas interações. Se a banda de frequência é suficientemente larga, o tempo de coerência do reservatório é curto e essa interferência é destrutiva, fazendo com que o fluxo de energia seja unidirecional. O resultado disso é uma dinâmica incoerente. Todavia, se a banda é curta (ressaltamos que isso deve ser comparado com o valor típico da densidade espectral), o tempo de coerência do reservatório se aproxima dos tempos significativos para a dinâmica (basicamente o inverso de γ_o), e a interação entre sistema e reservatório têm um caráter duplo, coerente e incoerente. Esse caráter duplo pode ser notado na figura 4.13, em que mostramos a evolução do valor médio de uma quadratura do sistema; o comportamento da curva cheia tem características de um batimento entre frequências próximas e uma tendência de decaimento.

É importante notar a diferença que existe entre um reservatório Markoviano térmico a temperatura elevada que fornece energia ao sistema e o reservatório não Markoviano. O primeiro fornece energia de modo incoerente, o que significa que ele não altera o valor

Figura 4.12 – Evolução da energia média para reservatórios Lorentzianos a temperatura zero, na aproximação de ondas girantes. As curvas pontilhadas apresentam comportamento Markoviano, enquanto a curva cheia apresenta um comportamento não-Markoviano

médio das quadraturas, mas leva as variâncias para um valor assintótico característica de uma temperatura elevada. O segundo, pelo caráter coerente, influencia também o valor médio, como é mostrado na figura 4.13, e não influencia o valor assintótico da energia, que ainda é zero.

4.3.1 Equação mestra

No capítulo 2 afirmamos que qualquer mapa de evolução gaussiano pode ser escrito como a solução de uma equação mestra, e fornecemos as maneiras de calcular os parâmetros que a definem. Como estamos interessados no decaimento da energia, o parâmetro relevante é $\gamma_1(t)$, que mostramos na figura 4.14. Vemos então como uma equação mestra pode simular um processo em que a interação sistema-reservatório é parcialmente coerente apenas com os termos incoerentes de Lindblad: permitindo que a taxa de decaimento se torne negativa. De fato, nas proximidades de um instante em que $dE/dt = 0$ na figura 4.12, a taxa de decaimento sofre uma variação abrupta de um valor positivo (e grande em módulo) para um valor negativo (e igualmente grande em módulo), e continua com

um valor negativo por mais alguns instantes. O parâmetro $\gamma_2(t)$ tem um comportamento similar, e acompanha $\gamma_1(t)$ com um valor ligeiramente menor em módulo (como acontece em um reservatório Markoviano térmico).

É importante mencionar que trabalhos recentes de Mazzola⁴⁵ e Breuer⁴⁶ também modelam o comportamento não Markoviano por meio de uma taxa negativa de decaimento.

Figura 4.13 – Evolução de uma quadratura para reservatórios Lorentzianos, na aproximação de ondas girantes. As curvas pontilhadas apresentam comportamento Markoviano, enquanto a curva cheia apresenta um comportamento não-Markoviano

Figura 4.14 – Evolução do parâmetro $\gamma_1(t)$ da equação mestra, que corresponde a uma taxa de decaimento. Para reservatórios não Markovianos, ele pode assumir um valor negativo

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

O tema central dessa dissertação é a interação entre um sistema quântico e o meio ambiente. No capítulo 1, expomos abreviadamente os principais desenvolvimentos históricos e algumas das técnicas que foram propostas para a análise desse problema. No capítulo 2, utilizamos da formulação da Mecânica Quântica no espaço de fase para a proposição de um método algébrico e computacionalmente eficiente para o tratamento exato da interação sistema-reservatório. O método proposto é dividido em três partes, explicitadas nas seções 2.1, 2.2 e 2.3. A primeira delas trata da resolução da dinâmica de uma rede de osciladores. Esse resultado é usado na segunda parte para obter uma dinâmica exata para um subconjunto dos osciladores dessa rede, que consideramos ser o sistema de interesse enquanto os demais osciladores exercem o papel de um reservatório. Finalmente, na terceira parte, mostramos que, sob qualquer regime de parâmetros da rede de osciladores, especialmente naquele que descreve o acoplamento forte sistema-reservatório, é possível obter uma equação mestra que descreva a evolução do sistema.

Comparando nossa técnica com outras que estão disponíveis para o mesmo fim, em especial a técnica de equações mestras (como descrita no apêndice B) e o modelo de Caldeira-Legget, verificamos que uma desvantagem da equação mestra usual é o papel essencial que nela desempenha a aproximação de Born-Markov. Ao fazer isso, ela deixa de considerar o efeito que o sistema pode exercer sobre o reservatório (devido à aproximação de Born) e também os efeitos do tempo de correlação finito do reservatório (devido à aproximação de Markov). Além disso, a aproximação de Born-Markov somente pode ser plenamente justificada em um limite de acoplamento fraco entre sistema e reservatório,

caso em que a escala de tempo imposta pelo acoplamento seja muito maior do que uma escala de tempo imposta por uma dinâmica interna do reservatório. Essas dificuldades são superadas pelo modelo de Caldeira-Legget, que é válido para intensidades fracas e fortes do acoplamento sistema-reservatório. Porém, como desvantagens do modelo, citamos a sua dependência da teoria dos funcionais de influência de Feynman-Vernon, que acreditamos ser desnecessariamente complicados para o problema em questão,

O método por nós proposto é mais simples e é naturalmente adequado para permitir uma abordagem computacional, que realizamos no capítulo 4. Com isso, conseguimos ilustrar de maneira direta os limites de validade das aproximações de Born-Markov, de ondas girantes, e o efeito dos termos contra-girantes. O efeito da forma da densidade espectral do reservatório sobre a dinâmica foi também analisado, especialmente no limite de tempos curtos. Embora alguns desses resultados tenham sido explorados explicitamente apenas de forma qualitativa nesse presente trabalho, a técnica permite uma análise mais quantitativa e detalhada das funções temporais que definem a equação mestra, tanto para um reservatório estruturado quanto para o limite do contínuo. Com relação à forma da densidade espectral, o modelo de Caldeira-Legget permite uma solução exata apenas para algumas formas especiais, enquanto que uma abordagem numérica necessária nos demais casos é feita de forma mais simples e rápida pelo modelo aqui apresentado.

Como outra vantagem, citamos o fato de que o desenvolvimento das seções 2.1 e 2.2 (até a equação 2.63) se mantém válido na ausência da hipótese de acoplamento súbito entre sistema e reservatório. Seguramente, os demais métodos apresentam dificuldades consideráveis para o tratamento desse caso. Como o nosso desenvolvimento parte de uma rede de osciladores, podemos em princípio lidar com qualquer estado inicial da rede, mesmo aqueles para os quais a hipótese de acoplamento súbito não se aplica.

REFERÊNCIAS

- 1 PONTE, M. A. de; MIZRAHI, S. S.; MOUSSA, M. H. Y. Networks of dissipative quantum harmonic oscillators: a general treatment. *Physical Review A*, v. 76, n. 3, 2007.
- 2 WEISSKOPF, W.; WIGNER, E. Berechnung der natürlichen linienbreite auf grund der diracshen lichttheorie. *Zeitschrift fur Physik A*, v. 63, n. 1-2, p. 54-73, 1930.
- 3 KANAI, E. On the quantization of the dissipative systems. *Progress of Theoretical Physics*, v. 3, n. 4, p. 440-442, 1948.
- 4 KOSTIN, M. D. On the Schrodinger - Langevin equation. *Journal of Chemical Physics*, v. 57, n. 9, p. 3589-3591, 1972.
- 5 YASUE, K. Quantum mechanics of nonconservative systems. *Annals of Physics*, v. 114, n. 1-2, p. 479-496, 1978.
- 6 DEKKER, H. Quantization of the linearly damped harmonic oscillator. *Physical Review A*, v. 16, n. 5, p. 2126-2134, 1977.
- 7 SENITZKY, I. R. Dissipation in quantum mechanics. the harmonic oscillator. *Physical Review*, v. 119, n. 2, p. 670-679, 1960.
- 8 KOCH, R. H.; HARLINGEN, D. J. V.; CLARKE, J. Quantum-noise theory for the resistively shunted Josephson junction. *Physical Review Letters*, v. 45, n. 26, p. 2132-2135, 1980.

- 9 CALDEIRA, A.; LEGGETT, A. Path integral approach to quantum Brownian motion. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 121, n. 3, p. 587–616, 1983.
- 10 FORD, G. W.; KAC, M.; MAZUR, P. Statistical mechanics of assemblies of coupled oscillators. *Journal of Mathematical Physics*, v. 6, n. 4, p. 504–515, 1965.
- 11 ICHE, G.; NOZIERES, P. Quantum Brownian motion of a heavy particle: an adiabatic expansion. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 91, n. 3–4, p. 485–506, 1978.
- 12 DAVIES, E. B. *Quantum theory of open systems*. New York: Academic Press, 1976.
- 13 CALDEIRA, A. O.; LEGGETT, A. J. Influence of dissipation on quantum tunneling in macroscopic systems. *Physical Review Letters*, v. 46, n. 4, p. 211–214, 1981.
- 14 ZUREK, W. H. Pointer basis of quantum apparatus: into what mixture does the wave packet collapse? *Physical Review D*, v. 24, n. 6, p. 1516–1525, 1981.
- 15 ZUREK, W. H. Environment-induced superselection rules. *Physical Review D*, v. 26, n. 8, p. 1862–1880, 1982.
- 16 NEUMANN, J. von. *The mathematical foundations of quantum mechanics*. Paris, France: Felix Alcan, 1947. 336 p.
- 17 JOOS, E.; ZEH, H. D. The emergence of classical properties through interaction with the environment. *Zeitschrift fur Physik B - Condensed Matter*, v. 59, n. 2, p. 223–243, 1985.
- 18 GHIRARDI, G. C.; RIMINI, A.; WEBER, T. Unified dynamics for microscopic and macroscopic systems. *Physical Review D*, v. 34, n. 2, p. 470–491, 1986.
- 19 PEARLE, P. Combining stochastic dynamical state-vector reduction with spontaneous localization. *Physical Review A*, v. 39, n. 5, p. 2277–2289, 1989.
- 20 MOUSSA, M. H. Y.; CALDEIRA, A. O. Extension of the GRWP model to translation

symmetry breaking processes. *Foundations of Physics Letters*, v. 9, n. 6, p. 521–534, 1996.

21 LANDAUER, R. Is quantum mechanics useful? *Philosophical transactions of the Royal Society A*, v. 353, n. 1703, p. 367–376, 1995.

22 BOAS, C. J. V.; ALMEIDA, N. G. de; MOUSSA, M. H. Y. Teleportation of a zero- and one-photon running-wave state by projection synthesis. *Physical Review A*, v. 60, n. 4, p. 2759–2763, 1999.

23 ALMEIDA, N. G. de; NAPOLITANO, R.; MOUSSA, M. H. Y. Accuracy of a teleported cavity-field state. *Physical Review A*, v. 62, n. 1, p. 010101, 2000.

24 POYATOS, J. F.; CIRAC, J. I.; ZOLLER, P. Quantum reservoir engineering with laser cooled trapped ions. *Physical Review Letters*, v. 77, n. 23, p. 4728–4731, 1996.

25 MYATT, C. J. et al. Decoherence of quantum superpositions through coupling to engineered reservoirs. *Nature*, v. 403, p. 269–273, 2000.

26 PRADO, F. O. et al. Nonadiabatic coherent evolution of two-level systems under spontaneous decay. *Physical Review Letters*, v. 102, n. 7, p. 073008, 2009.

27 LIDAR, D. A.; WHALEY, K. B. Decoherence-free subspaces and subsystems. In: BENATTI, F.; FLOREANINI, R. (Ed.). *Irreversible quantum dynamics*. Berlin: Springer Verlag, 2003, (Lecture Notes in Physics, v. 622). p. 83–120.

28 VIOLA, L.; KNILL, E. Random decoupling schemes for quantum dynamical control and error suppression. *Physical Review Letters*, v. 94, n. 6, p. 060502, 2005.

29 VITALI, D.; TOMBESI, P. Using parity kicks for decoherence control. *Physical Review A*, v. 59, n. 6, p. 4178–4186, 1999.

30 VIOLA, L.; KNILL, E.; LLOYD, S. Dynamical decoupling of open quantum systems. *Physical Review Letters*, v. 82, n. 12, p. 2417–2421, 1999.

31 VITALI, D.; TOMBESI, P. Heating and decoherence suppression using decoupling

techniques. *Physical Review A*, v. 65, n. 1, p. 012305, 2001.

32 BYRD, M. S.; LIDAR, D. A. Empirical determination of dynamical decoupling operations. *Physical Review A*, v. 67, n. 1, p. 012324, 2003.

33 FACCHI, P. et al. Control of decoherence: analysis and comparison of three different strategies. *Physical Review A*, v. 71, n. 2, p. 022302, 2005.

34 CELERI, L. C. et al. Switching off the reservoir through nonstationary quantum systems. *Journal of Physics B*, v. 41, n. 8, p. 085504, 2008.

35 PONTE, M. A. de; MIZRAHI, S. S.; MOUSSA, M. H. Y. Temperature effects on a network of dissipative quantum harmonic oscillators: collective damping and dispersion processes. *Journal of Physica A - Mathematical and Theoretical*, v. 42, n. 36, 2009.

36 PONTE, M. A. de; MIZRAHI, S. S.; MOUSSA, M. H. Y. Storing quantum states in bosonic dissipative networks. *Journal of Physics B*, v. 41, n. 21, p. 215506, 2008.

37 PONTE, M. A. de; MIZRAHI, S. S.; MOUSSA, M. H. Y. State protection under collective damping and diffusion. *Physical Review A*, v. 84, n. 1, 2011.

38 JAMES, D. F.; JERKE, J. Effective hamiltonian theory and its applications in quantum information. *Canadian Journal of Physics*, v. 85, n. 6, p. 625–632, 2007.

39 GLAUBER, R. Quantum theory of optical coherence: selected papers and lectures. Berlin, Germany: Wiley-VCH, 2007. 639 p.

40 BREUER, H.; PETRUCCIONE, F. The theory of open quantum systems. Oxford, UK: Oxford University Press, 2007. 625 p.

41 GHOSE, S.; SANDERS, B. Non-gaussian ancilla states for continuous variable quantum computation via gaussian maps. *Journal of Modern Optics*, v. 54, p. 855–869, 2007.

42 LASTRA, F.; REYES, S. A.; WALLENTOWITZ, S. Analytical model of non-Markovian decoherence in donor-based charge quantum bits. *Journal of Physics B*, v. 44,

n. 1, p. 015504, 2011.

43 CALDEIRA, A. O.; LEGGETT, A. J. Influence of damping on quantum interference: An exactly soluble model. *Physical Review A*, v. 31, n. 2, p. 1059–1066, 1985.

44 FANCHINI, F. F. et al. Non-markovian dynamics of quantum discord. *Physical Review A*, v. 81, n. 5, p. 052107, 2010.

45 MAZZOLA, L. et al. Phenomenological memory-kernel master equations and time-dependent markovian processes. *Physical Review A*, v. 81, n. 6, p. 062120, 2010.

46 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*, v. 103, n. 21, p. 210401, 2009.

47 KLIMOV, A.; CHUMAKOV, S. A group-theoretical approach to quantum optics: models of atom-field interactions. Berlin, Germany: Wiley-VCH, 2009. 322 p.

48 SCULLY, M.; ZUBAIRY, M. Quantum optics. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1997. 630 p.

49 LOUISELL, W. Quantum statistical properties of radiation. New York, USA: Wiley, 1990. 527 p.

50 LINDBLAD, G. On the generators of quantum dynamical semigroups. *Communications in Mathematical Physics*, v. 48, n. 2, p. 119–130, 1976.

51 GAMEL, O.; JAMES, D. F. V. Time-averaged quantum dynamics and the validity of the effective hamiltonian model. *Physical Review A*, v. 82, n. 5, 2010.

APÊNDICES

APÊNDICE A

MECÂNICA QUÂNTICA NO ESPAÇO DE FASE

A.1 Funções de quasi-probabilidade

Na formulação matemática usual, o estado de um sistema quântico é descrito por um operador densidade ρ definido em um espaço de Hilbert, que deve ser Hermiteano, não-negativo e com a condição de normalização

$$\text{Tr}(\rho) = 1 . \tag{A.1}$$

Em contraste, na Mecânica Estatística Clássica, o estado geral de um sistema é descrito por uma função de probabilidade definida em um espaço de fase, que deve ser real, não-negativa e normalizada de modo que

$$\int dqdp F(q, p) = 1 . \tag{A.2}$$

Similarmente, um observável quântico é descrito por um operador Hermiteano no espaço de Hilbert, enquanto um observável clássico é descrito por uma função real no espaço de fase.

Com isso em mente, já na década de 1930 Wigner e outros propuseram funções defini-

das em um espaço de fase que contenham a mesma informação que o operador densidade, e possam ser tomadas como uma descrição quântica do estado. Os observáveis quânticos seriam associados a observáveis clássicos, e o cálculo de valores médios seria realizado por meio de integrais no espaço de fase. Há um problema, contudo, com esse programa. Para uma grande parte dos estados, não é possível definir uma função não-negativa que permita calcular todos os observáveis;^{39, 47} a função assume valores negativos em determinadas regiões do espaço de fase, e essas (quasi-)probabilidades negativas são uma assinatura do caráter quântico desses estados. Devido a esses valores negativos, essas funções são chamadas de funções de quasi-probabilidade.

A.1.1 Regras de ordenamento

Um segundo problema que ocorre é que essas funções não são únicas. Os operadores de quadratura no espaço de Hilbert não comutam entre si, enquanto as correspondentes variáveis canônicas clássicas comutam. Isso gera ambiguidade no significado de expressões como

$$\int dqdp F(q, p) qp$$

Isso deve corresponder ao valor de $\langle \hat{q}\hat{p} \rangle$ ou $\langle \hat{p}\hat{q} \rangle$, ou a alguma combinação dos dois? Para superar isso, uma regra de ordenamento deve ser imposta. Existem três regras de ordenamento úteis em Óptica Quântica: normal, anti-normal e simétrica,⁴⁸ que são melhor entendidas em termos dos operadores de criação e destruição. O ordenamento normal tem todos os operadores de criação à esquerda (isto é, atuando depois) dos operadores de destruição, enquanto o contrário ocorre para o ordenamento anti-normal. No ordenamento simétrico, o operador correspondente ao monômio $\alpha^n \alpha^{*m}$ é uma média de todas as $\frac{(n+m)!}{n!m!}$ maneiras de ordenar os operadores a e $a^\dagger$. Para exemplificar, consideramos o operador associado à função $|\alpha|^2$

$$|\alpha|^2 \rightarrow \begin{cases} \frac{1}{2} (aa^\dagger + a^\dagger a) & \text{simétrico} \\ a^\dagger a & \text{normal} \\ aa^\dagger & \text{anti-normal} \end{cases} . \quad (\text{A.3})$$

A.1.2 Funções P de Glauber-Sudarshan e Q de Husimi

É simples deduzir uma expressão para a função de quasi-probabilidade no caso de ordenamento normal e anti-normal.

Um operador na ordem normal pode ser expresso como uma série de potências

$$O(a, a^\dagger) = \sum_{m,n=0}^{\infty} c_{m,n} a^{\dagger m} a^n . \quad (\text{A.4})$$

Utilizando um operador do tipo delta de Dirac dependente dos operadores de campo, é possível chegar a

$$\langle O(a, a^\dagger) \rangle = \int d^2\alpha \sum_{m,n=0}^{\infty} c_{m,n} \alpha^{*m} a^n \text{Tr}(\rho \delta(a^\dagger - \alpha^*) \delta(a - \alpha)) . \quad (\text{A.5})$$

A função de quasi-probabilidade nesse caso é chamada de função P de Glauber-Sudarshan,

$$P(\alpha) = \text{Tr}(\rho \delta(a^\dagger - \alpha^*) \delta(a - \alpha)) . \quad (\text{A.6})$$

A função de quasi-probabilidade associada ao ordenamento anti-normal é chamada de função Q de Husimi,

$$Q(\alpha) = \text{Tr}(\rho \delta(a - \alpha) \delta(a^\dagger - \alpha^*)) . \quad (\text{A.7})$$

Essa função é sempre positiva, e está relacionado a uma forma diagonal na base de estados coerentes,

$$Q(\alpha) = \frac{1}{\pi} \langle \alpha | \rho | \alpha \rangle . \quad (\text{A.8})$$

Isso parece contradizer o argumento anterior, de que não era possível encontrar uma distribuição de probabilidades quântica positiva. No entanto, uma expansão similar à A.4, na ordem anti-normal, diverge^{39,47} para a maioria dos observáveis, de modo que a função Q não é útil para calcular os seus valores médios.

A.2 Função característica simétrica

A Mecânica Estatística Clássica oferece outra maneira de descrever uma distribuição de probabilidades, além da distribuição de probabilidades. Essa forma alternativa é a função característica, que nada mais é do que uma transformada de Fourier da função de distribuição de probabilidade. Outra maneira de definir a função característica é pelo valor esperado de um operador da forma e^{ikX} ; traduzindo para a Mecânica Quântica, a função característica é o valor esperado do operador de deslocamento,

$$\chi(\{\alpha\}) = \left\langle \exp \left(\sum_k \left(\alpha_k a_k^\dagger - \alpha_k^* a_k \right) \right) \right\rangle. \quad (\text{A.9})$$

O operador de deslocamento está escrito na forma simétrica, e a função característica assim definida serve para calcular valores médios de operadores na ordem simétrica. A função característica para os ordenamentos normal e anti-normal são dadas pela forma normal e anti-normal, respectivamente, do operador de deslocamento,

$$\chi_N(\{\alpha\}) = \left\langle \exp \left(\sum_k \alpha_k a_k^\dagger \right) \exp \left(-\alpha_k^* a_k \right) \right\rangle \quad (\text{A.10a})$$

$$\chi_{AN}(\{\alpha\}) = \left\langle \exp \left(-\alpha_k^* a_k \right) \exp \left(\sum_k \alpha_k a_k^\dagger \right) \right\rangle. \quad (\text{A.10b})$$

Ao invés de integrais sobre todo o espaço de fase, os valores médios de observáveis simétricos são dados por derivadas da função característica calculadas na origem,

$$\langle \{a^n a^{\dagger m}\}_s \rangle = (-1)^n \frac{\partial^{n+m} \chi}{\partial \alpha^m \partial \alpha^{n*}} \Big|_{\alpha=0}. \quad (\text{A.11})$$

No estudo das redes de osciladores que será feito no capítulo 2, iremos nos concentrar nos operadores na ordem simétrica e especialmente nos momentos de primeiro e segunda ordem dos operadores de campo. Esses momentos são dados pelas derivadas de primeira

e segunda ordem da função característica,

$$\langle a_k \rangle = - \left. \frac{\partial \chi}{\partial \alpha_k^*} \right|_{\alpha=0} \quad (\text{A.12a})$$

$$\langle a_k^\dagger \rangle = \left. \frac{\partial \chi}{\partial \alpha_k} \right|_{\alpha=0} \quad (\text{A.12b})$$

$$\left\langle \frac{1}{2} (a_k^\dagger a_j + a_j a_k^\dagger) \right\rangle = - \left. \frac{\partial^2 \chi}{\partial \alpha_k \partial \alpha_j^*} \right|_{\alpha=0} \quad (\text{A.13a})$$

$$\langle a_k a_j \rangle = \left. \frac{\partial^2 \chi}{\partial \alpha_k^* \partial \alpha_j^*} \right|_{\alpha=0} \quad (\text{A.13b})$$

$$\langle a_k^\dagger a_j^\dagger \rangle = \left. \frac{\partial^2 \chi}{\partial \alpha_k \partial \alpha_j} \right|_{\alpha=0} . \quad (\text{A.13c})$$

Os momentos de primeira ordem não dependem do ordenamento, ao contrário dos momentos de segunda ordem.

APÊNDICE B

EQUAÇÃO MESTRA (DERIVAÇÃO MICROSCÓPICA)

Várias técnicas foram desenvolvidas para o tratamento de sistemas quânticos abertos; entre elas, citamos a técnica de equações mestras,^{40,49} o modelo de Caldeira-Legget,⁴³ baseada em integrais de trajetórias, e os modelos de quantum jumps e de Heisenberg-Langevin.⁴⁸ Desses, a técnica de equações mestras é a mais conhecida e difundida. Vamos nesse apêndice derivá-la para um sistema aberto considerando a sua interação com outros graus de liberdade (reservatório), em um desenvolvimento baseado em.⁴⁰

O Hamiltoniano de um sistema bipartite (aquele que pode ser dividido em dois subsistemas) pode ser escrito como a soma de três termos, os Hamiltonianos livres de cada subsistema e um termo de interação:

$$H = H_S \otimes \mathcal{I}^{(2)} + \mathcal{I}^{(1)} \otimes H_R + H_{int} . \quad (\text{B.1})$$

O acoplamento H_{int} sempre pode ser escrito na forma

$$H_{int} = \sum_{\alpha} S_{\alpha} \otimes V_{\alpha} , \quad (\text{B.2})$$

onde S_{α} e V_{α} são operadores Hermiteanos que atuam nos espaços de Hilbert do sistema e do ambiente, respectivamente.

A melhor forma de analisar o efeito de H_{int} é utilizar a equação de von Neumann

representação de interação,

$$\frac{d}{dt}\rho_I = -i[H_I(t), \rho_I(t)] , \quad (\text{B.3})$$

com o Hamiltoniano livre dado por $H_o = H_S \otimes \mathcal{I}^{(2)} + \mathcal{I}^{(1)} \otimes H_R$. O Hamiltoniano nessa representação é dado por

$$H_I(t) = e^{-iH_o t/\hbar} H_{int} e^{iH_o t/\hbar} = \sum_{\alpha} S_{\alpha}(t) \otimes V_{\alpha}(t) , \quad (\text{B.4})$$

com:

$$S_{\alpha}(t) = e^{iH_S t/\hbar} S_{\alpha} e^{-iH_S t/\hbar} \quad (\text{B.5a})$$

$$V_{\alpha}(t) = e^{iH_R t/\hbar} V_{\alpha} e^{-iH_R t/\hbar} . \quad (\text{B.5b})$$

Em geral, o acoplamento sistema-ambiente representado por H_{int} é fraco (veremos mais a frente o significado de fraco nesse caso). Faremos então uma expansão de segunda ordem, que consiste em uma integração formal da equação B.3,

$$\rho_I(t) = \rho_I(t_o) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_o}^t [H_I(t_1), \rho_I(t_1)] dt_1 , \quad (\text{B.6})$$

seguido pela substituição desse resultado de volta na equação B.3.

$$\frac{d}{dt}\rho_I(t) = \frac{1}{i\hbar} [H_I(t), \rho_I(t_o)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_o}^t [H_I(t), [H_I(t_1), \rho_I(t_1)]] dt_1 . \quad (\text{B.7})$$

Faremos agora uma primeira hipótese (conhecida como acoplamento súbito): no instante t_o , o sistema e o ambiente são descorrelacionados, de forma que

$$\rho_I(t_o) = \rho_S(t_o) \otimes \rho_R(t_o) . \quad (\text{B.8})$$

Substituindo esses resultados no primeiro termo da equação B.7, vemos que aparecem termos da forma $\text{Tr}(V_{\alpha}(t) \rho_R(t_o))$, que iremos considerar nulos (hipótese normalmente chamada de reservatório não-enviesado):

$$\text{Tr}(V_{\alpha}(t) \rho_R(t_o)) = 0 . \quad (\text{B.9})$$

Isso faz com que esse primeiro termo se cancele, e justifica a necessidade da expansão de segunda ordem.

Agora, substituímos a forma da interação no segundo termo e obtemos:

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = - \sum_{\alpha,\beta} \int_{t_o}^t \text{Tr}_2([S_\alpha(t) \otimes V_\alpha(t), [S_\beta(t_1) \otimes V_\beta(t_1), \rho_I(t_1)]] dt_1. \quad (\text{B.10})$$

Essa expressão é exata, dependendo apenas das hipóteses B.8 e B.9 (que podem ser facilmente verificadas, na maioria dos casos). Porém, ela apresenta algumas dificuldades, pois no lado direito ainda temos o operador densidade do sistema completo (gostaríamos de possuir uma descrição apenas em termos do estado reduzido), e ainda uma integração sobre o operador densidade em instantes passados.

Para superar essas dificuldades, é feita em primeiro lugar a aproximação de Born, que consiste em negligenciar o efeito do sistema sobre o estado do ambiente. Ela considera que a evolução do estado do reservatório é devido apenas ao Hamiltoniano livre H_R (e portanto é constante na representação de interação), e que, por consequência, o estado total é separável (na forma da equação B.8) em todos os instantes (e não apenas em $t = t_o$)

$$\rho_I(t_1) = \rho_S(t_1) \otimes \rho_R. \quad (\text{B.11})$$

Para contornar a dificuldade da integração em tempos passados, realizamos a aproximação de Markov, que consiste em substituir $\rho_S(t_1)$ por $\rho_S(t)$.

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = - \sum_{\alpha,\beta} \int_{t_o}^t \text{Tr}_R([S_\alpha(t) \otimes V_\alpha(t), [S_\beta(t_1) \otimes V_\beta(t_1), \rho_S(t) \otimes \rho_R]]) dt_1. \quad (\text{B.12})$$

Isso significa que a evolução temporal depende apenas do estado presente, ou, em outras palavras, é local no tempo. As duas aproximações são também conhecidas como a aproximação de Born-Markov, e a equação resultante B.12 é conhecida como a equação de Redfield.

A análise dessa equação envolve funções de correlação do ambiente na forma

$$\Gamma_{\alpha\beta}(t, t_1) = \langle V_\alpha(t) V_\beta(t_1) \rangle = \text{Tr}(V_\alpha e^{-iH_R(t-t_1)/\hbar} V_\beta e^{iH_R(t-t_1)/\hbar} \rho_R). \quad (\text{B.13})$$

A função de correlação é estacionária, o que significa que depende apenas da diferença $t - t_1$.

Uma hipótese satisfeita na maioria dos casos de interesse é

$$[\rho_R, H_R] = 0 . \quad (\text{B.14})$$

Em outras palavras, o estado do ambiente é um estado estacionário do seu Hamiltoniano livre; isso ocorre por exemplo para os estados de equilíbrio térmico.

Efetuada uma mudança de variável na equação B.12, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_S(t) = & - \sum_{\alpha, \beta} \int_0^{t-t_o} (\Gamma_{\alpha\beta}(t_1) S_\alpha(t) S_\beta(t-t_1) \rho_S(t) + \Gamma_{\beta\alpha}(-t_1) \rho_S(t) S_\beta(t-t_1) S_\alpha(t) \\ & - \Gamma_{\beta\alpha}(-t_1) S_\alpha(t) \rho_S(t) S_\beta(t-t_1) - \Gamma_{\alpha\beta}(t_1) S_\beta(t-t_1) \rho_S(t) S_\alpha(t)) . \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Segue da equação B.13 que

$$\Gamma_{\beta\alpha}(-t) = \text{Tr} (V_\beta e^{iH_R t/\hbar} V_\alpha e^{-iH_R t/\hbar} \rho_R) = \text{Tr} (V_\alpha e^{-iH_R t/\hbar} V_\beta e^{iH_R t/\hbar} \rho_R)^* = \Gamma_{\alpha\beta}(t)^* . \quad (\text{B.16})$$

A função de correlação decai a zero em uma escala de tempo característica τ_R . Portanto, para tempos longos comparados a esse ($t-t_o \gg \tau_R$), o limite superior da integração pode ser trocado para $+\infty$. Com isso, podemos simplificar a equação de Redfield:

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = \sum_{\alpha, \beta} \int_0^\infty \Gamma_{\alpha\beta}(t_1) (S_\beta(t-t_1) \rho_S(t) S_\alpha(t) - S_\alpha(t) S_\beta(t-t_1) \rho_S(t)) dt_1 + \text{H.c} . \quad (\text{B.17})$$

Tal equação contém os operadores $S_\alpha(t)$, cuja dependência ainda é desconhecida. Denotando por $\Pi(E)$ o projetor para o subespaço do sistema com energia E (valor médio do Hamiltoniano livre H_S), temos

$$\begin{aligned} S_\alpha(t) &= \sum_{E_1, E_2} \Pi(E_1) e^{iH_S t/\hbar} S_\alpha e^{-iH_S t/\hbar} \Pi(E_2) = \sum_{\omega} e^{-i\omega t} \sum_{E_2 - E_1 = \hbar\omega} \Pi(E_1) S_\alpha \Pi(E_2) \\ &= \sum_{\omega} e^{-i\omega t} S_\alpha(\omega) . \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

A soma em ω percorre todos os valores do espectro de Bohr do sistema (isso é, todos os valores para os quais existe um par de estados cuja diferença de energia seja $\hbar\omega$). No caso de um operador com espectro contínuo, a soma deve ser substituída por uma integral.

O operador $S(\omega)$ é chamado de um auto-operador (com relação ao Hamiltoniano H_S), pois satisfaz

$$[S_\alpha(\omega), H_S] = \omega S_\alpha(\omega) . \quad (\text{B.19})$$

O procedimento usado na equação B.18 é chamado de expansão espectral. A soma em ω pode percorrer valores discretos ou contínuos, e o operador $S_\alpha(\omega)$ só é definido e não nulo para os valores de ω que satisfazem a condição $E_2 - E_1 = \hbar\omega$.

Os auto-operadores satisfazem a propriedade

$$\mathcal{A}(-\omega) = \sum_{E_2 - E_1 = -\hbar\omega} \Pi(E_1) \mathcal{A} \Pi(E_2) = \left(\sum_{E_2 - E_1 = \hbar\omega} \Pi(E_1) \mathcal{A} \Pi(E_2) \right)^\dagger = \mathcal{A}(\omega)^\dagger . \quad (\text{B.20})$$

Substituindo o resultado B.18 na equação de Redfield, temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_S(t) &= \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\omega_1, \omega_2} e^{-i(\omega_1 + \omega_2)t} \int_0^\infty \Gamma_{\alpha\beta}(t_1) e^{i\omega_2 t_1} \\ &\quad \times (S_\beta(\omega_2) \rho_S(t) S_\alpha(\omega_1) - S_\alpha(\omega_1) S_\beta(\omega_2) \rho_S(t)) dt_1 + \text{H.c.} . \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Podemos finalmente realizar a integral sobre t_1 , com a definição

$$\Gamma_{\alpha\beta}(\omega) = \int_0^\infty \Gamma_{\alpha\beta}(t_1) e^{i\omega t_1} dt_1 . \quad (\text{B.22})$$

A equação B.21 contém termos que variam rapidamente no tempo (quando $\omega_1 + \omega_2 \neq 0$), e cuja contribuição se anula para as escalas de tempo da evolução de $\rho_S(t)$. Portanto, manteremos na soma apenas os termos que satisfazem $\omega_1 + \omega_2 = 0$.

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\omega} \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left(S_\beta(\omega) \rho_S(t) S_\alpha(\omega)^\dagger - S_\alpha(\omega)^\dagger S_\beta(\omega) \rho_S(t) \right) + \text{H.c.} . \quad (\text{B.23})$$

Manipulando essa equação, é possível obter

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_S(t) = & \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\omega} (\Gamma_{\alpha\beta}(\omega) + \Gamma_{\beta\alpha}(\omega)^*) \left(S_{\beta}(\omega) \rho_S(t) S_{\alpha}(\omega)^{\dagger} - \frac{1}{2} \left\{ S_{\alpha}(\omega)^{\dagger} S_{\beta}(\omega), \rho_S(t) \right\} \right) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\omega} (\Gamma_{\alpha\beta}(\omega) - \Gamma_{\beta\alpha}(\omega)^*) \left[S_{\alpha}(\omega)^{\dagger} S_{\beta}(\omega), \rho_S(t) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

B.1 Forma de Lindblad

A equação B.24 já representa a equação mestra que desejávamos, mas ainda podemos melhorar sua aparência. Começamos por notar que seu segundo termo tem a forma de um Hamiltoniano, e é chamado de termo de Lamb shift:

$$H_{LS} = \frac{i}{2} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\omega} (\Gamma_{\alpha\beta}(\omega) - \Gamma_{\beta\alpha}(\omega)^*) S_{\alpha}(\omega)^{\dagger} S_{\beta}(\omega). \quad (\text{B.25})$$

No primeiro termo, definimos o coeficiente

$$\begin{aligned} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) = & \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) + \Gamma_{\beta\alpha}(\omega)^* = \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_{\alpha\beta}(t_1) e^{i\omega t_1} dt_1 \\ = & \int_{-\infty}^{\infty} \langle V_{\alpha}(t_1) V_{\beta}(0) \rangle e^{i\omega t_1} dt_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \langle e^{iH_R t_1/\hbar} V_{\alpha} e^{-iH_R t_1/\hbar} V_{\beta} \rangle e^{i\omega t_1} dt_1. \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

Para um valor fixo de ω , a matriz $\gamma_{\alpha\beta}(\omega)$ é positiva,⁴⁰ e pode ser diagonalizada na forma

$$\gamma_{\alpha\beta}(\omega) = \sum_k C_{k\alpha}(\omega)^* C_{k\beta}(\omega). \quad (\text{B.27})$$

Para cada auto-valor $\Gamma_k(\omega)$, definimos os operadores

$$A_k(\omega) = \sum_{\alpha} C_{k\alpha}(\omega) S_{\alpha}(\omega). \quad (\text{B.28})$$

Esses operadores são chamados de operadores de Lindblad,⁵⁰ e são os responsáveis pela parte não-unitária da dinâmica. Condensando os índices k e ω em um único índice,

chegamos finalmente a uma equação mestra na representação de interação:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_S(t) &= -i[H_{LS}, \rho_S(t)] + \sum_k \left(A_k \rho_S(t) A_k^\dagger - \frac{1}{2} \{A_k^\dagger A_k, \rho_S(t)\} \right) \\ &= -i[H_{LS}, \rho_S(t)] + \frac{1}{2} \sum_k \left([A_k \rho_S(t), A_k^\dagger] + [A_k, \rho_S(t) A_k^\dagger] \right). \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

Como a função de correlação do reservatório é estacionária, isso implica que os operadores de Lindblad A_k são estacionários na representação de Schrödinger. A origem última desse fato portanto se encontra na aproximação de Born-Markov, que envolve desprezar o efeito do sistema sobre o reservatório. Em um modelo mais realista, que não invoque a aproximação de Born-Markov, é possível que os operadores de Lindblad sejam funções explícitas do tempo.

APÊNDICE C

DINÂMICA EFETIVA DE JAMES

No apêndice B, vimos como uma dinâmica efetiva não-Hamiltoniana pode surgir quando consideramos um sistema interagindo com graus de liberdade sobre os quais não possuímos controle. Isso também ocorre quando o sistema apresenta oscilações em uma frequência elevada, em uma escala de tempo em que os detectores não conseguem responder; o comportamento exato do operador densidade nessas escalas é portanto irrelevante do ponto de vista experimental. A descrição efetiva desse sistema, que elimina a parte de alta frequência do espectro, leva a uma dinâmica não-Hamiltoniana semelhante à equação B.29.

C.1 Hamiltoniano efetivo

O desenvolvimento deste apêndice será baseado no artigo.³⁸

Consideramos um Hamiltoniano na representação de interação, que varia rapidamente no tempo. Em primeira aproximação, poderíamos considerar que esses termos não influem na dinâmica; entretanto, eles podem ter efeitos de segunda ordem. Começamos então com um procedimento similar ao que foi adotado no apêndice B, de integrar formalmente a equação de Schrödinger e substituir de volta o resultado:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t_o)\rangle + \frac{1}{i\hbar} H(t) \int_{t_o}^t H(t_1) |\psi(t_1)\rangle dt_1 . \quad (\text{C.1})$$

O primeiro termo (efeito de primeira ordem) é desprezado, e no segundo termo é feita a aproximação de Markov, substituindo $|\psi(t_1)\rangle$ por $|\psi(t)\rangle$. A equação adquire a forma de uma equação de Schrödinger, com Hamiltoniano efetivo dado por

$$H_{eff}(t) = \frac{1}{i\hbar} H(t) \int_{t_0}^t H(t_1) dt_1. \quad (C.2)$$

Consideramos um Hamiltoniano com dependência temporal harmônica (a maioria das situações experimentais se encaixa nessa categoria).

$$H(t) = \sum_n (h_n e^{-i\omega_n t} + h_n^\dagger e^{i\omega_n t}). \quad (C.3)$$

Com isso, o Hamiltoniano efetivo fica dado por:

$$\begin{aligned} H_{eff}(t) &= \sum_{m,n} (h_m e^{-i\omega_m t} + h_m^\dagger e^{i\omega_m t}) \frac{1}{\hbar\omega_n} (h_n e^{-i\omega_n t} - h_n e^{-i\omega_n t_0} - h_n^\dagger e^{i\omega_n t} + h_n^\dagger e^{i\omega_n t_0}) \\ &= \sum_{m,n} \frac{1}{\hbar\omega_n} (h_m^\dagger h_n e^{i(\omega_m - \omega_n)t} - h_m h_n^\dagger e^{-i(\omega_m - \omega_n)t}) \\ &= \sum_{m,n} \left(\frac{h_m^\dagger h_n}{\hbar\omega_n} - \frac{h_n h_m^\dagger}{\hbar\omega_m} \right) e^{i(\omega_m - \omega_n)t} \\ &= \frac{1}{2\hbar} \sum_{m,n} \left(\{h_m^\dagger, h_n\} \left(\frac{1}{\omega_n} - \frac{1}{\omega_m} \right) + [h_m^\dagger, h_n] \left(\frac{1}{\omega_n} + \frac{1}{\omega_m} \right) \right) e^{i(\omega_m - \omega_n)t}. \end{aligned} \quad (C.4)$$

Na segunda linha, foram eliminados os termos da forma $e^{i\omega_n t}$ e $e^{i(\omega_m + \omega_n)t}$, que variam rapidamente no tempo. Esse Hamiltoniano não é Hermiteano, e pode ser separado em duas partes:

$$H_{eff}^{(S)} = \frac{1}{2} (H_{eff} + H_{eff}^\dagger) = \frac{1}{2\hbar} \sum_{m,n} [h_m^\dagger, h_n] \left(\frac{1}{\omega_n} + \frac{1}{\omega_m} \right) e^{i(\omega_m - \omega_n)t} \quad (C.5)$$

$$H_{eff}^{(A)} = \frac{1}{2i} (H_{eff} - H_{eff}^\dagger) = \frac{1}{2i\hbar} \sum_{m,n} \{h_m^\dagger, h_n\} \left(\frac{1}{\omega_n} - \frac{1}{\omega_m} \right) e^{i(\omega_m - \omega_n)t}. \quad (C.6)$$

Um Hamiltoniano não-Hermiteano não conserva norma, e não pode ser considerado físico. Podemos, no entanto, considerar uma equação mestra para o operador densidade,

na forma

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\rho(t) &= \frac{1}{i\hbar} \left(H_{eff}^{(S)} + iH_{eff}^{(A)} \right) \rho(t) - \frac{1}{i\hbar} \rho(t) \left(H_{eff}^{(S)} - iH_{eff}^{(A)} \right) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[H_{eff}^{(S)}, \rho(t) \right] + \frac{1}{\hbar} \left\{ H_{eff}^{(A)}, \rho(t) \right\} .\end{aligned}\quad (C.7)$$

Essa equação ainda não é física, pois não conserva o traço,

$$\frac{d}{dt} \text{Tr}(\rho(t)) \neq 0 . \quad (C.8)$$

Na equação B.29, vemos que aparecem termos envolvendo $\{A^\dagger A, \rho\}$, juntamente com termos da forma $A\rho A^\dagger$ que são necessários para conservar o traço. Como o operador $H_{eff}^{(A)}$ é Hermiteano e negativo-definido, ele admite ser escrito na forma

$$H_{eff}^{(A)} = -\frac{\hbar}{2} \sum_{\alpha} S_{\alpha}^{\dagger} S_{\alpha} . \quad (C.9)$$

Para obter uma equação mestra física, adicionamos então os termos da forma $A\rho A^\dagger$ à equação C.7:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\rho(t) &= \frac{1}{i\hbar} \left[H_{eff}^{(S)}, \rho(t) \right] - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \left\{ S_{\alpha}^{\dagger} S_{\alpha}, \rho(t) \right\} + \sum_{\alpha} S_{\alpha} \rho(t) S_{\alpha}^{\dagger} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[H_{eff}^{(S)}, \rho(t) \right] + \sum_{\alpha} \left(S_{\alpha} \rho(t) S_{\alpha}^{\dagger} - \frac{1}{2} \left\{ S_{\alpha}^{\dagger} S_{\alpha}, \rho(t) \right\} \right) .\end{aligned}\quad (C.10)$$

Em muitas situações, a componente anti-Hermiteana C.6 é pequena e desprezível frente à componente Hermiteana C.5, de modo que a dinâmica ainda é unitária, e o procedimento de desprezar a parte anti-Hermiteana é chamado de simetrização do Hamiltoniano.

C.2 Equação mestra efetiva

A derivação anterior, embora direta, é pouco rigorosa, pois depende da adição ad hoc de um termo à equação mestra. De fato, seu início assume a existência de um vetor de estado, que evolui de acordo com uma dinâmica não-unitária, o que não deixa de ser uma contradição. O propósito dessa subseção, baseada em um trabalho posterior de James,⁵¹ será uma derivação mais rigorosa da equação C.10.

Começamos por definir a média de operadores (inclusive o operador densidade) como

$$\overline{\mathcal{A}(t)} = \int_{-\infty}^{\infty} f(t - t_1) \mathcal{A}(t_1) dt_1, \quad (\text{C.11})$$

onde $f(t)$ é uma função real, com área unitária e aproximadamente zero para $t \gg \tau_D$, em que τ_D é da ordem de grandeza do tempo de resposta dos detectores.

A média temporal do operador densidade é

$$\overline{\rho(t)} = \overline{U(t, t_o) \rho(t_o) U^\dagger(t, t_o)}. \quad (\text{C.12})$$

O operador de evolução será calculado por meio de uma expansão em série, no parâmetro λ que surge multiplicando o Hamiltoniano de interação (no final, será feito $\lambda = 1$).

$$U(t, t_o) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n U_n(t, t_o). \quad (\text{C.13})$$

A equação relevante é

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_o) = \lambda H(t) U(t, t_o). \quad (\text{C.14})$$

Substituindo a expansão C.13 na equação C.12, temos

$$\begin{aligned}\overline{\rho(t)} &= \sum_{m,n=0}^{\infty} \lambda^{m+n} \overline{U_n(t, t_o) \rho(t_o) U_m^\dagger(t, t_o)} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \sum_{m=0}^n \overline{U_{n-m}(t, t_o) \rho(t_o) U_m^\dagger(t, t_o)} .\end{aligned}\quad (\text{C.15})$$

Essa expressão define o mapa

$$\overline{\rho(t)} = \mathcal{E}(\rho(t_o)) . \quad (\text{C.16})$$

Podemos definir também o mapa inverso,

$$\rho(t_o) = \mathcal{F}(\overline{\rho(t)}) . \quad (\text{C.17})$$

Expandindo ambos os mapas em série de potências de λ , temos

$$\sum_{m,n=0}^{\infty} \lambda^{m+n} \mathcal{E}_n(\mathcal{F}_m(\rho)) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \sum_{m=0}^n \mathcal{E}_{n-m}(\mathcal{F}_m(\rho)) = \mathcal{I} \quad (\text{C.18a})$$

$$\sum_{m,n=0}^{\infty} \lambda^{m+n} \mathcal{F}_n(\mathcal{E}_m(\rho)) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \sum_{m=0}^n \mathcal{F}_{n-m}(\mathcal{E}_m(\rho)) = \mathcal{I} . \quad (\text{C.18b})$$

Segue de $\mathcal{E}_0(\rho) = \rho$ a relação de recorrência

$$\mathcal{F}_n(\rho) = - \sum_{m=1}^n \mathcal{F}_{n-m}(\mathcal{E}_m(\rho)) . \quad (\text{C.19})$$

Utilizando os mapas definidos, temos

$$\frac{d}{dt} \overline{\rho(t)} = \frac{d}{dt} \mathcal{E}(\rho(t_o)) = \sum_{m,n=0}^{\infty} \lambda^{m+n} \dot{\mathcal{E}}_n \left(\mathcal{F}_m(\overline{\rho(t)}) \right) . \quad (\text{C.20})$$

Aqui definimos o mapa $\dot{\mathcal{E}}_n(\rho)$, que é uma derivada temporal do mapa $\mathcal{E}_n(\rho)$.

$$\dot{\mathcal{E}}_n(\rho) = \sum_{m=0}^n \frac{d}{dt} \overline{U_{n-m}(t) \rho U_m^\dagger(t)} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{m=0}^{n-1} \overline{\left[H(t), U_{n-1-m}(t) \rho U_m^\dagger(t) \right]} . \quad (\text{C.21})$$

A equação C.20 por sua vez define o mapa

$$\frac{d}{dt}\overline{\rho(t)} = \mathcal{L}\left(\overline{\rho(t)}\right), \quad (\text{C.22})$$

cujas expansão pode ser escrita explicitamente em termos dos mapas $\dot{\mathcal{E}}_n$ e $\mathcal{F}_n$:

$$\mathcal{L}_n(\rho) = \sum_{m=0}^{n-1} \dot{\mathcal{E}}_{n-m}(\mathcal{F}_m(\rho)). \quad (\text{C.23})$$

O termo de primeira ordem,

$$\mathcal{L}_1(\rho) = \dot{\mathcal{E}}_1(\mathcal{F}_0(\rho)) = \frac{1}{i\hbar} \left[\overline{H(t)}, \rho \right], \quad (\text{C.24})$$

é a própria dinâmica unitária gerada pela média temporal do Hamiltoniano, que é nula em muitos casos de interesse. Por esse motivo, há a necessidade de considerar o termo de segunda ordem,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_2(\rho) &= \dot{\mathcal{E}}_2(\mathcal{F}_0(\rho)) + \dot{\mathcal{E}}_1(\mathcal{F}_1(\rho)) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \overline{\left[H(t), \left(U_1(t) - \overline{U_1(t)} \right) \rho + \rho \left(U_1^\dagger(t) - \overline{U_1^\dagger(t)} \right) \right]}. \end{aligned} \quad (\text{C.25})$$

Podemos simplificar considerando que $U_1^\dagger(t) = -U_1(t)$, o que leva a:

$$\mathcal{L}_2(\rho) = \frac{1}{i\hbar} \overline{\left[H(t), \left[U_1(t) - \overline{U_1(t)}, \rho \right] \right]}. \quad (\text{C.26})$$

Consideramos agora o Hamiltoniano com dependência temporal harmônica. As aproximações feitas na seção anterior se traduzem como

$$\overline{e^{i\omega_n t}} = \overline{e^{i(\omega_m + \omega_n)t}} = 0 \quad (\text{C.27a})$$

$$\overline{e^{i(\omega_m - \omega_n)t}} = e^{i(\omega_m - \omega_n)t}. \quad (\text{C.27b})$$

Essas condições são equivalentes a

$$\omega_n \tau_D \gg 1 \quad (\text{C.28})$$

$$|\omega_m - \omega_n| \tau_D \ll 1 . \quad (\text{C.29})$$

Isso nos fornece a escala de tempo em que a aproximação de James é válida.

Utilizando então que $\overline{H(t)} = \overline{U_1(t)} = 0$, obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_2(\rho) &= \sum_{m,n} \frac{1}{i\hbar^2 \omega_n} \overline{\left[h_m e^{-i\omega_m t} + h_m^\dagger e^{i\omega_m t}, \left[h_n e^{-i\omega_n t} - h_n^\dagger e^{i\omega_n t}, \rho \right] \right]} \\ &= \sum_{m,n} \frac{1}{i\hbar^2 \omega_n} \left([h_m^\dagger, [h_n, \rho]] e^{i(\omega_m - \omega_n)t} - [h_m, [h_n^\dagger, \rho]] e^{-i(\omega_m - \omega_n)t} \right) \\ &= \frac{1}{2i\hbar^2} \sum_{m,n} \left(\frac{1}{\omega_n} + \frac{1}{\omega_m} \right) [[h_m^\dagger, h_n], \rho] e^{i(\omega_m - \omega_n)t} \\ &\quad + \frac{1}{i\hbar^2} \sum_{m,n} \left(\frac{1}{\omega_n} - \frac{1}{\omega_m} \right) \left(\frac{1}{2} \{ \{ h_m^\dagger, h_n \}, \rho \} - h_m^\dagger \rho h_n - h_n \rho h_m^\dagger \right) e^{i(\omega_m - \omega_n)t} . \end{aligned} \quad (\text{C.30})$$

O primeiro termo define um Hamiltoniano efetivo,

$$H_{eff}(t) = \frac{1}{2\hbar} \sum_{m,n} \left(\frac{1}{\omega_n} + \frac{1}{\omega_m} \right) [h_m^\dagger, h_n] e^{i(\omega_m - \omega_n)t} , \quad (\text{C.31})$$

enquanto o segundo termo representa uma dinâmica não-unitária. Definindo a matriz

$$\gamma_{m,n} = i \left(\frac{1}{\omega_n} - \frac{1}{\omega_m} \right) , \quad (\text{C.32})$$

esse segundo termo é escrito como

$$\mathcal{D}(\rho) = \frac{1}{\hbar} \sum_{m,n} \gamma_{m,n} \left(h_m^\dagger \rho h_n + h_n \rho h_m^\dagger - \frac{1}{2} \{ \{ h_m^\dagger, h_n \}, \rho \} \right) e^{i(\omega_m - \omega_n)t} . \quad (\text{C.33})$$

A matriz $\gamma_{m,n}$ é Hermiteana e de traço nulo, e admite a diagonalização

$$\gamma_{m,n} = \sum_k \gamma_k C_{km}^* C_{kn} . \quad (\text{C.34})$$

Para cada auto-valor, definimos os operadores

$$A_k(t) = \frac{1}{\hbar} \sum_n C_{kn} h_n e^{-i\omega_n t} . \quad (\text{C.35})$$

Isso permite escrever o termo dissipativo na forma de Lindblad:

$$\mathcal{D}(\rho) = \sum_k \gamma_k \left(A_k \rho A_k^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ A_k^\dagger A_k, \rho \right\} + A_k^\dagger \rho A_k - \frac{1}{2} \left\{ A_k A_k^\dagger, \rho \right\} \right) . \quad (\text{C.36})$$

Assim como no caso do apêndice B, os operadores de Lindblad são constantes na representação de Schrödinger. As aproximações envolvidas nessa conclusão são a hipótese de acoplamento, que justifique a expansão em série de potências, e as médias temporais das equações C.27.

APÊNDICE D

ESTRUTURA SIMPLÉTICA

Os operadores de posição e momento em Mecânica Quântica obedecem a uma relação de comutação que define uma álgebra simplética. Essa álgebra tem sempre um número par de geradores, satisfazendo

$$[\hat{x}_k, \hat{x}_j] = i\Omega_{k,j} . \quad (\text{D.1})$$

Os coeficientes $\Omega_{k,j}$ precisam ser anti-simétricos,

$$\Omega_{j,k} = -\Omega_{k,j} , \quad (\text{D.2})$$

e obedecerem à relação

$$\sum_n \Omega_{k,n} \Omega_{j,n} = \sum_n \Omega_{n,k} \Omega_{n,j} = \delta_{k,j} . \quad (\text{D.3})$$

É importante notar que as propriedades da álgebra simplética dependem apenas desses fatos, e não de uma forma explícita para Ω . Em geral, quando os operadores de quadratura são ordenados na forma $(\hat{q}_1, \hat{p}_1, \dots, \hat{q}_n, \hat{p}_n)^T$, a matriz Ω assume a forma

$$\Omega = \mathcal{I}_n \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} . \quad (\text{D.4})$$

Uma transformação canônica (no contexto de Mecânica Clássica) ou unitária (no contexto de Mecânica Quântica) é aquela que preserva a estrutura da álgebra (relações

de comutação ou parênteses de Poisson). Para uma transformação linear,

$$\hat{x}_k = \sum_j U_{j,k} \hat{y}_j + b_k , \quad (\text{D.5})$$

é necessário que

$$\Omega_{k,j} = \sum_{m,n} U_{m,k} U_{n,j} \Omega_{m,n} . \quad (\text{D.6})$$

Na notação matricial, isso equivale a:

$$U^T \Omega U = \Omega . \quad (\text{D.7})$$

Na representação de Heisenberg, a evolução do sistema quântico é representada por uma família de transformações lineares e unitárias, que é denotada por uma família de matrizes $U(t)$ e vetores $b(t)$ satisfazendo a condição D.7.

Uma matriz que satisfaz a condição D.7 é chamada de matriz simplética. Ela é sempre inversível, com

$$U^{-1} = \Omega^T U^T \Omega . \quad (\text{D.8})$$

Dada uma matriz simplética U , são também simpléticas as matrizes U^T , $\Omega^T U \Omega$ e U^{-1} . A matriz identidade é simplética, e o produto de duas matrizes simpléticas é também simplética, o que dá ao conjunto de todas as matrizes simpléticas a estrutura de um grupo, naturalmente chamado de grupo simplético. Sendo também um grupo de Lie, ele possui uma álgebra de Lie associada. Para obter as propriedades dessa álgebra, precisamos considerar apenas os elementos do grupo infinitesimalmente próximos a identidade,

$$U = \exp(\epsilon A) \approx 1 + \epsilon A . \quad (\text{D.9})$$

Em primeira ordem em ϵ , a condição D.7 se traduz como

$$A^T \Omega + \Omega A = 0 . \quad (\text{D.10})$$

Escrevendo $A = \Omega B$, e usando $\Omega \Omega^T = \mathcal{I}$ (equação D.3), vemos que B é uma matriz

simétrica. Existe portanto uma correspondência entre matrizes simétricas e simpléticas, e um elemento qualquer do grupo simplético pode ser escrito como

$$U = \exp (\Omega B) \text{ .} \tag{D.11}$$

De fato, o grupo simplético para n graus de liberdade (correspondendo a matrizes de dimensão $2n$) tem dimensão $n(2n+1)$, a mesma dimensão do conjunto de matrizes simétricas.