

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

**Clara Rodrigues Vidor**

**Estudo de superoperadores exatos na forma de Lindblad  
para dinâmicas de sistemas quânticos abertos  
correlacionados com o ambiente**

**São Carlos**

**2023**



**Clara Rodrigues Vidor**

**Estudo de superoperadores exatos na forma de Lindblad  
para dinâmicas de sistemas quânticos abertos  
correlacionados com o 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 Teórica e Experimental

Orientador: Prof. Dr. Frederico Borges de Brito

**Versão corrigida**

**(Versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)**

**São Carlos**

**2023**

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

Vidor, Clara Rodrigues

Estudo de superoperadores exatos na forma de Lindblad  
para dinâmicas de sistemas quânticos abertos  
correlacionados com o ambiente / Clara Rodrigues Vidor;  
orientador Frederico Borges de Brito - versão corrigida --  
São Carlos, 2023.  
106 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em  
Física Teórica e Experimental) -- Instituto de Física de São  
Carlos, Universidade de São Paulo, 2023.

1. Sistemas quânticos abertos. 2. Equações mestras. 3.  
Correlações quânticas. I. Borges de Brito, Frederico,  
orient. II. Título.

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Frederico Brito, pelo suporte, atenção e pelos ensinamentos. Pelo investimento feito para se manter presente durante todo esse tempo. Não apenas por orientar o meu trabalho, mas também por compartilhar conhecimentos sobre a carreira científica e por me encorajar.

À minha família: meus avós Daut, Irene, Marlene e Valdomiro; meus pais Cadiamara e Dalton e meus irmãos Cecília e Pedro. A saudade pelos anos de distância física é grande, mas é maior o carinho que vocês demonstram constantemente e que me conforta tanto. Sou muito feliz por ter vocês, do jeito que são, ao meu lado. Agradeço imensamente pelo apoio no caminho, pelo suporte nas dificuldades e pela alegria com as minhas conquistas.

Aos meus amigos Andrés, Guilherme, Hot Wheels, Julha, Julia e Momo. Pelos bandecos, treinos, almoços de domingo e tantos outros momentos. Vocês são minha família em São Carlos nos melhores sentidos que essa palavra pode ter. Ao Lucas, que foi meu suporte durante muitos momentos difíceis e minha companhia em ótimas lembranças. Ao Ian, com quem aprendi a ser mais tranquila e enxergar as coisas de maneiras diferentes. Aos meus amigos da graduação e mais antigos, que sempre torcem por mim.

Ao grupo do professor Diogo, por me receber para vários cafés e conversas e me acolher como uma de vocês. Aos jovens quânticos por todas as trocas de conhecimento. Ao André e ao Ivan pelo tempo, atenção e pelas dicas. Ao Rodrigo e ao Guilherme por tantas discussões interessantes, que contribuíram para a minha formação e ao mesmo tempo me propiciaram momentos de divertimento.

Por fim, agradeço a todos os funcionários do IFSC que ofereceram um ambiente com as condições necessárias para o desenvolvimento deste trabalho. Também sou grata pelo importante financiamento da CAPES. O presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) Código de financiamento 001.



## RESUMO

VIDOR, C. R. **Estudo de superoperadores exatos na forma de Lindblad para dinâmicas de sistemas quânticos abertos correlacionados com o ambiente.** 2023. 106p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2023.

Equações mestras na forma de Lindblad são amplamente usadas para associar propriedades físicas às dinâmicas de sistemas quânticos abertos. Essas conexões costumam se apoiar nos termos unitário e dissipativo resultantes de uma separação do superoperador de Lindblad. E as possíveis ambiguidades nessa separação podem ser resolvidas, por exemplo, adotando uma representação canônica. No entanto, equações mestras locais dessa forma geralmente são justificadas por aproximações de acoplamento fraco entre o sistema e o ambiente e separabilidade do estado inicial. Para generalizar medidas baseadas na equação de Lindblad para sistemas quânticos quaisquer, é necessário conhecer as equações dinâmicas para casos mais gerais. Contudo, a presença de correlações entre o sistema e o ambiente pode restringir o domínio físico de validade dos superoperadores que evoluem o sistema. Aqui examinamos propostas recentes para encontrar equações dinâmicas exatas na forma de Lindblad para sistemas quânticos reduzidos correlacionados com o ambiente. Também apresentamos uma alternativa válida para subsistemas cujo hamiltoniano nu comuta com o hamiltoniano de interação. Essa proposta recupera todos os operadores densidade do espaço do sistema reduzido como domínio físico de validade na ausência de correlações no estado inicial. Ao final, mostramos que superoperadores obtidos por diferentes métodos não são equivalentes, inclusive em aspectos fundamentais como a alteração do hamiltoniano efetivo pelas correlações. Podendo, assim, levar a interpretações físicas equivocadas se não forem utilizados com cuidado.

**Palavras-chave:** Sistemas quânticos abertos. Equações mestras. Correlações quânticas.





## ABSTRACT

VIDOR, C. R. **Study of exact superoperators in the Lindblad form for dynamics of open quantum systems correlated with the environment.** 2023. 106p. Dissertation (Master in Science) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2023.

Lindblad master equations are widely used to associate physical properties to open quantum systems dynamics. These connections are usually based on a division of the Lindblad superoperator in unitary and dissipative terms. And the ambiguities in this separation can be solved by adopting a canonical representation. However, these local master equations are commonly justified by weak coupling approximations and separability of the initial state. To generalize measures based on Lindblad master equations to generic quantum systems, it is necessary to know the equations for all cases. Nevertheless, the presence of correlations between the system and the environment can restrict the physical domain of the superoperators which evolve the system. We explore recent proposals for finding exact Lindblad master equations for reduced systems correlated with the environment. We also present an alternative valid when the subsystem's bare Hamiltonian commutes with the interaction Hamiltonian. This proposal recovers all the density operators of the reduced system's space as a physical domain of validity in the absence of initial correlations between the system and the environment. Finally, we show that the superoperators by different methods are not equivalent, including fundamental aspects such as the change of the effective Hamiltonian by the correlations. This can result in unphysical interpretations if the superoperators are not carefully used.

**Keywords:** Open quantum systems. Master equations. Quantum correlations.



## LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 – Parte real e imaginária da função de correlação do banho em função do tempo para três conjuntos de frequências. Utilizou-se (a) cinco, (b) quinze e (c) trezentas frequências igualmente espaçadas entre 0 e  $5 \omega/\omega_c$ . Observa-se que os tempos de recorrência aumentam conforme o espaçamento entre as frequências diminui. Para 300 frequências o tempo de recorrência está além do intervalo observado. Parâmetros utilizados em todos os gráficos:  $\eta = 10$  e  $T = 10^{-2}\omega_c$ .  
**Fonte:** Elaborada pela autora. . . . . 63
- Figura 2 – Função de correlação do banho para contínuos modos e uma densidade espectral ôhmica  $\mathcal{J}(\omega) = \eta\omega e^{-\omega/\omega_c}$ . Utilizou-se os parâmetros  $\eta = 0.1$  e  $T = 10^{-2}\omega_c$  e a integral nas frequências foi calculada com os limites 0 e  $10 \omega/\omega_c$ . Observa-se o decaimento inicial da função de correlação e um perfil semelhante ao que já era resultante na figura 1 quando utilizou-se 300 frequências.  
**Fonte:** Elaborada pela autora. . . . . 64
- Figura 3 – Diferença no decaimento da coerência do sistema de dois níveis para três ordens diferentes de intensidade da interação com o ambiente para uma densidade espectral ôhmica  $\mathcal{J}(\omega) = \eta\omega e^{-\omega/\omega_c}$ . Observa-se que o decaimento é mais rápido para valores maiores de  $\eta$ . Para  $\eta = 1.0$ , por exemplo, a escala é da mesma ordem daquela da função de correlação do banho apresentada na figura 2, tornando improcedente assumir que estas últimas decaem muito mais rápido do que a escala de evolução do sistema mesmo para um banho que possui contínuas frequências. Essa diferença nas escalas de tempo é essencial para a argumentação que justifica as aproximações de Born-Markov e a mudança no limite da integral (4.7). Para todos os cálculos utilizou-se  $T = 10^{-2}\omega_c$ .  
**Fonte:** Elaborada pela autora. . . . . 65



## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

HP	Hermitian-preserving
TP	Trace-preserving
TA	Trace-annihilating
CP	Completely positive
CPTP	Completely positive and trace-preserving
HPTP	Hermitian-preserving and trace-preserving
HPTA	Hermitian-preserving and trace-annihilating
NZ	Nakajima-Zwanzig
TCL	Time convolutionless



## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>15</b>
<b>2</b>	<b>FORMALISMO MATEMÁTICO</b>	<b>19</b>
<b>2.1</b>	<b>Espaços de Hilbert, notação de Dirac e evoluções unitárias</b>	<b>19</b>
2.1.1	Sistemas compostos	22
<b>2.2</b>	<b>Operadores densidade</b>	<b>24</b>
2.2.1	Generalização de evoluções unitárias para operadores densidade e estados mistos	26
<b>2.3</b>	<b>Operador densidade reduzido</b>	<b>27</b>
2.3.1	Efeitos em estados reduzidos	28
<b>3</b>	<b>SUPEROPERADORES</b>	<b>31</b>
<b>3.1</b>	<b>Propriedades básicas</b>	<b>31</b>
3.1.1	Forma diagonal e forma pseudo-Kraus	32
3.1.2	Forma de Kraus - mapas CP	33
<b>3.2</b>	<b>De um mapa HPTP a um mapa HPTA</b>	<b>34</b>
3.2.1	Propriedades $\mathcal{L}(t)$ a partir dos coeficientes	35
<b>3.3</b>	<b>Mapa HPTA na forma de Lindblad</b>	<b>36</b>
3.3.1	Diagonalização do termo dissipativo	37
3.3.2	Arbitrariedade na separação	38
3.3.3	Termo unitário como uma projecção	39
3.3.4	Superoperador HPTA quando o mapa é inversível	40
<b>3.4</b>	<b>Mapas HPTP e HPTA a partir de dinâmicas físicas</b>	<b>41</b>
3.4.1	Quando há correlação no estado inicial	42
3.4.2	Condições gerais para a linearidade da dinâmica de um conjunto	45
3.4.3	Superoperador HPTA em dinâmicas físicas	47
<b>4</b>	<b>MÉTODOS PARA ENCONTRAR EQUAÇÕES MESTRAS</b>	<b>51</b>
<b>4.1</b>	<b>Aproximação de Born-Markov</b>	<b>51</b>
<b>4.2</b>	<b>Operadores de projecção</b>	<b>54</b>
4.2.1	Nakajima-Zwanzig	55
4.2.2	TCL	57
4.2.2.1	Expansão em série perturbativa	58
<b>4.3</b>	<b>Um exemplo de aplicação</b>	<b>58</b>
4.3.1	Correlações clássicas	60
4.3.2	Funções de correlação do ambiente	61

<b>5</b>	<b>SUPEROPERADORES NA FORMA DE LINDBLAD SEM APROXIMAÇÕES</b>	<b>67</b>
<b>5.1</b>	<b>Método geral</b>	<b>67</b>
5.1.1	A transformação de correlação	68
5.1.2	Construção do gerador na versão de correlação	71
5.1.3	Derivação de uma equação universal na forma de Lindblad	72
5.1.4	Observações em relação à linearidade de $\mathcal{L}^x$	73
5.1.5	Jaynes-Cummings	74
5.1.6	Observações	75
<b>5.2</b>	<b>Dinâmicas inversíveis - Mapas lineares para correlações iniciais</b>	<b>75</b>
<b>6</b>	<b>PROPOSTAS ALTERNATIVAS E COMPARAÇÕES</b>	<b>79</b>
<b>6.1</b>	<b>Proposta para encontrar equações mestras exatas para dinâmicas específicas</b>	<b>79</b>
6.1.1	Hamiltonianos que mantêm a diagonal constante	81
6.1.2	Construção de um superoperador HPTA	82
6.1.3	Estado produto e mapa linear	83
<b>6.2</b>	<b>Exemplo: sistema aberto de dois níveis</b>	<b>85</b>
6.2.1	Base alternativa	86
6.2.2	Aplicando a uma evolução específica	88
<b>6.3</b>	<b>Superoperador através da base espectral</b>	<b>90</b>
6.3.1	Dissipador	91
6.3.2	Comparação com o método proposto	92
<b>6.4</b>	<b>Replacement map</b>	<b>94</b>
6.4.1	Exemplo	95
<b>6.5</b>	<b>Comparações e observações</b>	<b>97</b>
<b>7</b>	<b>CONCLUSÃO</b>	<b>99</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>103</b>



## 1 INTRODUÇÃO

A dinâmica de um sistema quântico aberto é determinada pelas interações entre seus componentes e também com outros sistemas quânticos que compõem o seu entorno, que chamaremos de ambiente. Nesse contexto, novas características emergem e dinâmicas não unitárias passam a ser permitidas. A criação de correlações entre o sistema e o ambiente resulta no decaimento das coerências do sistema reduzido e dinâmicas irreversíveis com dissipação de energia e evolução para estados estacionários são observadas. Portanto, é necessário utilizar técnicas mais gerais para descrever estas evoluções.

Como nenhum sistema real é perfeitamente isolado, as previsões exatas devem ser obtidas através de um formalismo para sistemas abertos. A depender do grau de precisão desejado, operações unitárias podem descrever satisfatoriamente os resultados de sistemas que interagem fracamente com o ambiente. No entanto os conhecimentos teóricos e experimentais e também a demanda por tecnologias mais precisas evidenciam a ação inevitável do ambiente nos sistemas quânticos analisados. Computação quântica, por exemplo, se utiliza da capacidade de emaranhamento e interferência quânticas para propor a realização de tarefas com maior eficiência que computadores clássicos. (1) Porém, essas mesmas propriedades são facilmente reduzidas em sistemas abertos devido às interações com o ambiente, o que acaba limitando os tempos de implementação e a confiabilidade dos resultados desses algoritmos. (2) Outra situação em que é essencial a compreensão das dinâmicas de sistemas abertos é no estudo de processos químicos e biológicos. Onde cada componente interage com um ambiente extremamente grande e diverso, mas ainda pode apresentar efeitos cujo desempenho é explicado devido à preservação de propriedades quânticas por tempos mais longos do que os tipicamente atingidos em sistemas artificiais. (3,4) De maneira geral, evoluções não unitárias estarão presentes em qualquer sistema, natural ou não. E é o seu conhecimento que permite a correta compreensão dos fenômenos observados e a implementação eficiente de mecanismos quânticos para fins predeterminados.

O aumento das possibilidades para essas evoluções em relação às unitárias vem acompanhado de grandes desafios. Dentre eles, está a dificuldade em encontrar equações dinâmicas locais e exatas e identificar critérios que meçam precisamente quantidades como fluxo de informação e energia interna. Uma dessas quantidades de grande importância está relacionada com o conceito de markovianidade, que sinaliza o quanto as dinâmicas mantêm ou perdem informação dos estados passados do sistema. Como a markovianidade é tida como um indicador de perda de informação, entende-se que dinâmicas não-markovianas poderiam preservar por tempos mais longos as características quânticas, que permitem performances distintas das clássicas. Devido a este ganho, grandes esforços tem sido feitos

para encontrar classificações satisfatórias assim como para identificar esses comportamentos experimentalmente. (5,6)

Dentre as propostas mais apreciadas para medir markovianidade e energia interna de sistemas abertos, existem as que se apoiam em equações dinâmicas locais e suas separações em termos unitário e dissipativo. (7,8) Essas equações usualmente são tomadas na chamada forma de Lindblad, originalmente demonstrada para semigrupos dinâmicos. (9,10) Comumente se justifica o uso dessas equações sob aproximações que não são satisfeitas de maneira geral. Uma das aproximações mais comuns é a consideração de que o universo começa em um estado produto entre o sistema e o ambiente, que é suficiente para garantir a linearidade do mapa que evolui o estado inicial. Sem a separabilidade, o operador que dá a dinâmica do sistema de interesse em geral possuirá um termo que não é linear no operador densidade reduzido, mas também não é fisicamente compatível com qualquer operador densidade. Criando uma adversidade para quem deseja encontrar operadores lineares locais para essas evoluções.

Contudo, para generalizar de forma natural as medidas que se utilizam das separações entre os termos da equação dinâmica e suas respectivas características, é necessário identificá-los para dinâmicas mais gerais. Recentemente foi demonstrado que qualquer dinâmica de um sistema aberto pode ser descrita por uma equação local e na forma de Lindblad independentemente da presença de correlações iniciais, banho e intensidade de acoplamento. (11) Isso abre possibilidades para a investigação do significado físico dos termos unitário e dissipativo dessa equação e a generalização de medidas de quantidades termodinâmicas e de fluxo de informação.

Neste trabalho, revisamos as características de superoperadores, em especial as separações entre os termos unitário e dissipativo na forma de Lindblad. Discutimos o efeito do termo de correlação do estado total nas dinâmicas reduzidas e mostramos diferentes métodos para a obtenção de superoperadores lineares e exatos na forma de Lindblad que admitem o correlações iniciais entre o sistema e o ambiente. Comparamos as características desses superoperadores e questionamos suas implicações físicas.

No capítulo 2 começamos com um resumo do formalismo matemático utilizado em mecânica quântica. A equação de Schrödinger, a descrição de medidas em sistemas fechados e a introdução da representação vetorial de sistemas compostos levam à generalização das evoluções quânticas para sistemas abertos. Nesse capítulo, comentamos a motivação da representação de estados por operadores densidade e como a mesma representação torna-se necessária para sistemas abertos.

No capítulo 3 apresentamos matematicamente as características de superoperadores como preservação de traço, hermiticidade, formas de pseudo-Kraus e Kraus. Discutimos as arbitrariedades nas separações entre termo unitário e dissipativo e como escolher uma única representação. Também comentamos as relações dessas propriedades com di-

---

nâmicas físicas de sistemas fechados e abertos. Ademais, verificamos o surgimento dos termos não lineares para as dinâmicas reduzidas e a restrição da compatibilidade física de certos estados do ambiente, correlações e estados reduzidos. Ao final do capítulo, relembramos o extenso uso de equações dinâmicas na forma de Lindblad para o estudo de propriedades físicas

O capítulo 4 retoma as aproximações mais comuns que justificam o uso de equações locais na forma de Lindblad para descrever a dinâmica de sistemas reduzidos: as aproximações de Born-Markov. Mostramos como essas equações podem ser equivalentemente obtidas através dos métodos de operadores de projeção sem fazer uso de suposições fortes como a separabilidade a todo o instante. Analisamos um caso específico de interação entre sistema e ambiente que ilustra os limites de suposições a respeito de diferenças de escalas de tempo e decaimentos utilizados para reivindicar a veracidade de certas aproximações.

No capítulo 5 descrevemos a derivação e o resultado recente a respeito da generalidade da equação de Lindblad para qualquer dinâmica física. Também expomos os resultados obtidos em (12) de uma equação para o sistema reduzido fazendo uso apenas de informações iniciais a respeito do sistema e do ambiente para dinâmicas inversíveis.

Posteriormente, no capítulo 6 discutimos como encontrar um superoperador de Lindblad com conhecimento apenas da dinâmica do sistema reduzido por três maneiras diferentes. Comparamos as equações mestras resultantes entre si. Dois completamente gerais, sendo um a proposta de (13) com algumas adaptações na forma da equação. O terceiro é válido apenas para dinâmicas em que o hamiltoniano nu comuta com o hamiltoniano de interação, mas apresenta propriedades interessantes como a recuperação das equações lineares tradicionais para estados separáveis.

Por fim, no capítulo 7, revisamos as conexões entre os métodos apresentados e suas possíveis consequências.



## 2 FORMALISMO MATEMÁTICO

Começamos introduzindo os conceitos básicos usados na descrição matemática da mecânica quântica. Essas são as ferramentas que nos habilitam fazer previsões adequadas aos resultados conhecidos. Nesta seção, retomaremos como espaços vetoriais e operadores lineares são usados para fazer previsões a respeito de sistemas quânticos fechados. Uma exposição resumida desse formalismo incluindo operadores densidade está em. (14) Não falaremos explicitamente em termos de postulados, mas apresentações tradicionais que os citam podem ser encontradas em. (1) e (15) Essas referências possuem uma discussão mais detalhada dos postulados da mecânica quântica, operadores densidade e também estados reduzidos. Para a reformulação dos postulados incluindo diretamente sistemas abertos, consultar. (16) No que será exposto aqui, sistemas abertos sempre serão encarados como componentes de um universo fechado. Conseqüentemente suas características serão observadas como consequências do que será abordado para estes últimos.

### 2.1 Espaços de Hilbert, notação de Dirac e evoluções unitárias

Representamos matematicamente sistemas quânticos através de espaços vetoriais complexos  $\mathcal{H}$  munidos de produto interno. Esses espaços são ditos espaços de Hilbert de diferentes dimensões, a dimensão apropriada dependendo do sistema físico em questão. Neste trabalho, focaremos em espaços de Hilbert de dimensão finita e usaremos a notação de Dirac para representar os vetores nesse espaço. De acordo com essa notação, um vetor é representado pelo símbolo  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ , que chamamos de ket. Quando idealizamos que todos os componentes de um ensemble quântico foram preparados exatamente da mesma maneira, representamos estes estados por um vetor  $|\psi\rangle$  normalizado no espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  apropriado. Assim como todo vetor nesse espaço de Hilbert representa um estado possível do sistema. A esse espaço de Hilbert chamamos espaço de estados. Veremos que a fase relativa entre dois vetores que compõem o mesmo estado altera a determinação do estado físico final. No entanto, não há previsões físicas diferentes relacionadas a diferentes fases globais de  $|\psi\rangle$ .

O produto interno de dois vetores  $|\psi_1\rangle = \sum_i \alpha_i |i\rangle$  e  $|\psi_2\rangle = \sum_i \beta_i |i\rangle$  é dado por

$$(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle) = \sum_{ii} \alpha_i^* \beta_i. \quad (2.1)$$

De onde se verifica a linearidade no segundo argumento, positividade do produto de um vetor por ele mesmo e a conjugação ao alterar a ordem dos vetores  $(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle) =$

$(|\psi_2\rangle, |\psi_1\rangle)^*$ . Uma base  $\{|i\rangle\}_{i=1,\dots,N}$  de  $\mathcal{H}$  é ortonormal quando

$$(|i\rangle, |j\rangle) = \delta_{ij} \quad \forall i, j = 1, \dots, N. \quad (2.2)$$

Os funcionais lineares do espaço dual de  $\mathcal{H}$  são representados pelos bras  $\langle\psi|$ . A partir do produto interno entre dois vetores, associamos a cada ket  $|\psi\rangle$  um único dual  $\langle\psi|$ . Representamos por  $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = c \in \mathbb{C}$  o resultado do funcional  $\langle\psi_1|$  em um vetor  $|\psi_2\rangle$ . O dual  $\langle\psi_1|$  de  $|\psi_1\rangle$  é definido como o funcional cuja ação em qualquer vetor se iguala ao produto do seu dual por esse mesmo vetor:

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = c = (|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle), \quad \forall |\psi_2\rangle \in \mathcal{H} \quad (2.3)$$

Operadores lineares que atuam em  $\mathcal{H}$  levando a outros elementos do mesmo espaço formam o espaço  $\mathcal{L}(\mathcal{H}) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ . Na notação de Dirac,  $|\psi\rangle\langle\phi|$  é um elemento de  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$  que tem a atuação em um vetor qualquer  $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$  definida por

$$(|\psi\rangle\langle\phi|)|\Psi\rangle = |\psi\rangle(\langle\phi|\Psi\rangle) \quad (2.4)$$

O traço de um operador linear  $A$  é a operação dada por  $Tr\{A\} = \sum_i \langle i|A|i\rangle$  onde o índice  $i$  percorre todos os vetores  $|i\rangle$  que formam uma base ortonormal de  $\mathcal{H}$ . É possível demonstrar que o traço é independente de base e é igual à soma dos elementos da diagonal da matriz que representa  $A$ . Com a operação do traço, define-se em  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$  um produto interno: o produto de Hilbert Schmidt, dado por  $(A, B) = Tr\{A^\dagger B\}$ . E, tomando uma base  $\{|i\rangle\}_{i=1,2,\dots,N}$  de  $\mathcal{H}$  e a base dual  $\{\langle i|\}_{i=1,2,\dots,N}$ , o conjunto de operadores formados por todas as diferentes combinações  $\{|i\rangle\langle j|\}_{i,j=1,2,\dots,N}$  forma uma base do espaço de operadores lineares em  $\mathcal{H}$ . Assim,  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$  torna-se também um espaço de Hilbert de dimensão  $d^2$ . Onde cada elemento  $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  pode ser escrito através de uma combinação dos elementos dessa base:  $A = \sum_{ij} a_{ij} |i\rangle\langle j|$ ,  $a_{ij} \in \mathbb{C}$ , sendo  $A|\Psi\rangle = \sum_{ij} a_{ij} |i\rangle(\langle j|\Psi\rangle)$ .

Usando as propriedades do produto interno do espaço de estados, é possível verificar que cada operador  $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  definido dessa forma é linear:

$$A(\alpha_1 |\psi_1\rangle + \alpha_2 |\psi_2\rangle) = \alpha_1 A|\psi_1\rangle + \alpha_2 A|\psi_2\rangle, \quad \forall \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}, \quad e \quad |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H} \quad (2.5)$$

O produto  $AB$  de operadores lineares é definido por  $AB|\phi\rangle = A(B|\phi\rangle) \quad \forall |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ . É importante notar que, em geral  $AB \neq BA$ . Por essa razão, em diversos contextos em física quântica, é importante conhecer o comutador entre dois operadores  $A$  e  $B$ , definido por  $[A, B] = AB - BA$ .

É comum o uso das representações matriciais dos vetores e operadores. Kets são tomados como matrizes coluna, onde cada entrada de  $|\psi\rangle$  em uma base  $\{|i\rangle\}_{i=1,2,\dots,N}$  é dada por  $(|\psi\rangle)_i = \langle i|\psi\rangle$ . Analogamente, bras são representados por matrizes linha de entradas  $(\langle\psi|)_i = \langle\psi|i\rangle$  e operadores em  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$  são matrizes quadradas de entradas

$(A)_{ij} = \langle i|A|j\rangle$ . O produto interno entre vetores e a ação dos operadores lineares nos vetores podem ser calculados através de produtos matriciais. Por exemplo, o resultado da concatenação de operações lineares (o produto  $AB$  entre dois vetores) é dado pela multiplicação das matrizes correspondentes aos operadores.

O conjugado hermitiano  $A^\dagger$  de um operador  $A$  é definido como aquele para o qual  $\langle\phi'| = \langle\phi|A^\dagger$  resulta exatamente no conjugado de  $|\phi'\rangle = A|\phi\rangle$  para todo vetor  $|\phi\rangle$ . Decorre dessa definição e das propriedades do produto interno entre vetores que  $\langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle = \langle\phi|A|\psi\rangle^*$ . Disso, verifica-se que a matriz de  $A^\dagger$  em uma base escolhida é dada pela transposta conjugada de  $A$  nessa mesma base. Também é possível verificar que

$$(A^\dagger)^\dagger = A, \quad (\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger, \quad (A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger, \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \quad (2.6)$$

Um operador  $A$  é chamado hermitiano se e somente se  $A^\dagger = A$ . É possível mostrar que todos os autovalores de um operador hermitiano são reais e os autovetores correspondentes a diferentes autovalores são ortogonais. (17) Mesmo quando o espectro do operador é degenerado, é possível encontrar para o espaço de Hilbert em questão uma base de autovetores desse operador que sejam todos ortogonais entre si. Portanto, todo operador hermitiano pode ser diagonalizado em uma base ortonormal onde todos os autovalores que compõem a sua diagonal nessa base são valores reais.

Um operador  $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  é positivo semidefinido ( $A > 0$ ) se e somente se

$$\langle\phi|A|\phi\rangle \geq 0, \quad \forall |\phi\rangle \in \mathcal{H} \quad (2.7)$$

Analogamente, um operador positivo semidefinido pode ser definido como um operador hermitiano cujos autovalores são todos não-negativos. Como todo operador positivo semidefinido é hermitiano, também é diagonalizável em uma base de autovetores ortogonais. A partir da base diagonal, não é difícil ver que todo operador positivo pode ser escrito como um produto de um operador e seu hermitiano conjugado  $AA^\dagger$ . (18) O inverso também vale: todo  $B = AA^\dagger$ , é um operador positivo semidefinido para o qual vale (2.7).

Um operador unitário  $U$  é definido como aquele cujo inverso  $U^{-1}$  é igual ao adjunto  $U^\dagger$ :  $UU^\dagger = U^\dagger U = I$ . É simples verificar que o produto interno entre dois vetores não é alterado pela ação de um operador unitário:  $\langle\psi'_1|\psi'_2\rangle = \langle\psi_1|U^\dagger U|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\psi_2\rangle$ . Dessa forma, aplicar um operador unitário a cada elemento de uma base ortonormal levará a outra base ortonormal.

A evolução temporal de um vetor de estado de um sistema fechado é dada pela equação de Schrödinger

$$i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle \quad (2.8)$$

onde tomamos a constante de Planck  $\hbar = 1$ . O operador  $H$  é um operador hermitiano e é chamado hamiltoniano. A solução dessa equação pode ser escrita como  $|\psi(t)\rangle =$

$U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$  onde  $U(t, t_0)$  é um operador unitário chamado operador de evolução temporal e depende dos instantes  $t_0$  e  $t_1$  e do hamiltoniano.

As quantidades físicas mensuráveis (por exemplo variação de energia, spin, momento e posição) são descritas por operadores hermitianos em  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ , chamados observáveis. Os resultados possíveis da medida são os autovalores desse observável - todos reais como consequência de estarem associados a um operador hermitiano.

A probabilidade do sistema dado pelo vetor  $|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle$  ser medido em um estado  $j$  é dada por

$$|c_j|^2 = |\langle\psi|j\rangle|^2 = \langle\psi|j\rangle\langle j|\psi\rangle = \langle\psi|P_j|\psi\rangle, \quad (2.9)$$

onde  $P_j = |j\rangle\langle j|$  é o projetor ( $P_j^2 = P_j$ ) em  $|j\rangle$ . A soma de todos os projetores ortogonais associados à medida de um mesmo observável deve recuperar a identidade  $\sum_k P_k = I$ . Pela normalização do vetor, isso significa que a probabilidade total de ser medido em algum dos vetores é  $\sum_j \langle\psi|P_j|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1$ . Em sistemas clássicos, tomamos como hipótese que as medidas podem ser feitas sem interferir no estado estudado. Em mecânica quântica essa consideração não pode ser feita: qualquer medida, ainda que idealizada, possui a capacidade de alterar o estado do sistema físico. O vetor normalizado que representa o estado do sistema após o sistema ser medido no subespaço associado ao projetor  $P_j$  é dado por

$$|\psi\rangle = \frac{P_j|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_j|\psi\rangle}} \quad (2.10)$$

As medidas em um sistema físico podem ser definidas de forma mais abrangente do que medidas projetivas através de um conjunto de operadores positivos  $\{E_m\}$  que não precisam ser operadores de projeção, mas que satisfazem a relação de completude  $\sum_m E_m = I$ , mantendo a soma de todas as probabilidades de medições igual a 1. Essa descrição é mais realista pois inclui situações comuns em que o aparato de medição não condiz com as características de operadores de projeção. Porém, é possível mostrar que a adição de um sistema auxiliar, evolução unitária para o sistema composto e medidas projetivas recupera para o sistema de interesse as características das medidas mais gerais.

(1)

### 2.1.1 Sistemas compostos

Nesse momento, passaremos a imaginar situações mais complexas em que o sistema fechado que consideramos até então é formado por subsistemas quânticos que podem interagir entre si. Considere dois espaços de estados  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$  de dimensões  $N_1$  e  $N_2$  que descrevem os possíveis estados de dois sistemas. O conjunto desses dois sistemas é um novo sistema físico, ao qual está associado um novo espaço de estados dado por  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . O produto tensorial de elementos  $|i^{(1)}\rangle$  de  $\mathcal{H}_1$  e  $|i^{(2)}\rangle$  de  $\mathcal{H}_2$  são elementos do espaço  $\mathcal{H}$ :



$|i^{(1)}\rangle \otimes |j^{(2)}\rangle = |\psi_{ij}\rangle \in \mathcal{H}$ . Ou seja, vetores que associam um vetor de estado para o subsistema 1 e outro para o subsistema 2 são vetores no espaço de estados do sistema total. O conjunto de todos os vetores  $|\psi_{ij}\rangle$  formados pelas combinações dos vetores das bases de  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$  formam uma base de  $\mathcal{H}$ . Portanto, todo elemento do espaço total pode ser escrito como uma combinação linear de vetores  $|i^{(1)}\rangle \otimes |j^{(2)}\rangle$ :

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} \alpha_{ij} |i^{(1)}\rangle \otimes |j^{(2)}\rangle \quad (2.11)$$

Fisicamente, isso significa que um estado genérico do sistema total é uma superposição de vetores que associam um vetor de estado para cada subsistema. Fica claro que nem todo elemento do espaço  $\mathcal{H}$  pode ser escrito como um único produto tensorial de elementos de  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$  separadamente, como fizemos com  $|\psi_{ij}\rangle$ . Isso se reflete fisicamente na característica de estados quânticos que chamamos de emaranhamento. Um exemplo de estado emaranhado é dado por

$$\frac{|0^{(1)}0^{(2)}\rangle + |1^{(1)}1^{(2)}\rangle}{\sqrt{2}} \quad (2.12)$$

onde  $|0^{(i)}\rangle$  e  $|1^{(i)}\rangle$  são estados ortogonais e  $|i^{(1)}j^{(2)}\rangle$  representa o mesmo que  $|i^{(1)}\rangle \otimes |j^{(2)}\rangle$ .

Operadores que atuam em apenas um subsistema também podem ser vistos como operadores no sistema total. Para cada operador linear  $A^{(1)} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1)$  é possível associar um novo operador  $\tilde{A} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ , chamado *extensão* de  $A^{(1)}$  da seguinte forma:

$$\tilde{A}(|i^{(1)}\rangle \otimes |j^{(2)}\rangle) = (A^{(1)} |i^{(1)}\rangle) \otimes |j^{(2)}\rangle \quad (2.13)$$

e, analogamente para operadores  $B^{(2)} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$

$$\tilde{B}(|i^{(1)}\rangle \otimes |j^{(2)}\rangle) = |i^{(1)}\rangle \otimes (B^{(2)} |j^{(2)}\rangle) \quad (2.14)$$

É possível definir novos operadores em  $\mathcal{H}$  dados pelo produto tensorial de vetores nos subespaços:

$$(A^{(1)} \otimes B^{(2)})(|i^{(1)}\rangle \otimes |j^{(2)}\rangle) = (A^{(1)} |i^{(1)}\rangle) \otimes (B^{(2)} |j^{(2)}\rangle) \quad (2.15)$$

De forma que identificamos para as extensões definidas anteriormente  $\tilde{A} = A^{(1)} \otimes I^{(2)}$  e  $\tilde{B} = I^{(1)} \otimes B^{(2)}$ . O operador linear mais geral em  $\mathcal{H}$  será uma combinação de operadores que atuam em cada um dos subespaços:  $C = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \otimes B_{\alpha}$ .

Para um sistema total formado de  $N$  subsistemas, o espaço que representa os estados do sistema total são vetores em  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$ . Todo o formalismo pode ser estendido para esse sistema composto de  $N$  partes considerando as  $N - 1$  primeiras como um único subsistema em conjunto com a  $N$ -ésima e posteriormente fazendo o mesmo para cada uma das  $N - 1$  divisões.

## 2.2 Operadores densidade

Em várias situações reais existe uma incerteza clássica em relação a qual é o estado do sistema. Por exemplo, quando a preparação de um ensemble não é perfeita e hora um estado é preparado, hora outro, o ensemble será composto por diversos estados com certas proporções para cada estado. Se queremos prever as probabilidades de diferentes medidas em um sistema com esse tipo de incerteza, precisamos incluí-la na descrição. A superposição de dois vetores formando um novo estado  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle)$  não recupera esse tipo de probabilidade porque os estados  $|\psi_1\rangle$  e  $|\psi_2\rangle$  podem interferir entre si e alterar probabilidades de obter certos valores que seriam possíveis medindo apenas  $|\psi_1\rangle$  ou  $|\psi_2\rangle$ .

Para verificar esse fato, supomos  $|\psi_1\rangle = \alpha_1 |0\rangle + \beta_1 |1\rangle$  e  $|\psi_2\rangle = \alpha_2 |0\rangle + \beta_2 |1\rangle$  onde as amplitudes de probabilidade  $\alpha_i$  e  $\beta_i$  definem  $|\psi\rangle$  normalizado. A probabilidade de medir o sistema no estado  $|0\rangle$  é  $|\alpha_1|^2$  se ele for representado por  $|\psi_1\rangle$ , e  $|\alpha_2|^2$  se for representado por  $|\psi_2\rangle$ . Em um sistema com uma incerteza clássica associada aos estados  $|\psi_1\rangle$  e  $|\psi_2\rangle$  e igual probabilidade de ser descrito por cada um deles, a probabilidade de ser medido em  $|0\rangle$  é dada por  $\frac{1}{2}(|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2)$ . Já para uma superposição quântica entre os estados  $|\psi_1\rangle$  e  $|\psi_2\rangle$ , que é o caso do vetor  $|\psi\rangle$  definido anteriormente, essa mesma probabilidade torna-se

$$\frac{1}{2} \left( |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + 2|\alpha_1||\alpha_2| \cos(\phi_1 - \phi_2) \right) \quad (2.16)$$

onde  $\phi_1$  e  $\phi_2$  são as fases de  $\alpha_1 = |\alpha_1|e^{i\phi_1}$  e  $\alpha_2 = |\alpha_2|e^{i\phi_2}$  respectivamente. Para diferentes valores dessas fases, a probabilidade total de medir  $|0\rangle$  na superposição pode aumentar ou diminuir em relação ao cenário de incerteza clássica. No caso limite, se  $|\alpha_1| = |\alpha_2|$ , as fases relativas podem anular essa probabilidade. Um caso simples é dado pela superposição de  $|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$  e  $|\psi_2\rangle = e^{i\phi} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$  onde  $\phi = 0$  implica em  $|\psi\rangle = |0\rangle$  e  $\phi = 2\pi$  implica em  $|\psi\rangle = |1\rangle$ . Esse tipo de interferência não deve aparecer quando temos apenas uma incerteza clássica associada ao estado do sistema. Um estado como  $|\psi\rangle$  é bem definido, a incerteza associada à medida de observáveis é uma característica fundamental de sistemas quânticos e é diferente da incerteza clássica que estamos procurando descrever.

Com o objetivo de prever resultados para sistemas com incerteza clássica, introduzimos os operadores densidade:

$$\rho = \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|, \quad (2.17)$$

onde os  $p_k$  representam a probabilidade do sistema ser encontrado em cada estado normalizado  $|\psi_k\rangle$ . Portanto,  $p_k \geq 0$ ,  $\forall k$  e  $\sum_k p_k = 1$ . Nessa construção não exigimos que os vetores  $|\psi_k\rangle$  sejam ortogonais e, portanto, o somatório não tem uma quantidade limitada de termos.

Além disso, para um operador densidade específico, a decomposição em estados puros não é única. Basta pensar em um operador densidade de um sistema de dois níveis

que é uma mistura de estados puros ortogonais  $\rho = \frac{3}{4} |0\rangle \langle 0| + \frac{1}{4} |1\rangle \langle 1| = \frac{1}{4} I + \frac{1}{2} |0\rangle \langle 0|$ . Para qualquer base que usamos para escrever a identidade, esse operador é a mistura dos estados puros correspondentes aos vetores da base e  $\frac{1}{2} |0\rangle \langle 0|$ . Então existem infinitas decomposições possíveis desse operador em estados puros. Mas a decomposição em estados puros ortogonais é única e corresponde àquela que diagonaliza o operador.

É fácil notar que  $Tr\{\rho\} = \sum_k p_k = 1$ . Como os pesos  $p_k$  são positivos, também é direto verificar que  $\rho(t)$  é hermitiano. Além disso,  $\langle \phi | \rho | \phi \rangle = \sum_k p_k |\langle \phi | \psi_k \rangle|^2 \geq 0$ ,  $\forall |\phi\rangle \in \mathcal{H}$  implica que operadores densidade são operadores positivos semidefinidos. Tomando uma base ortonormal  $|i\rangle$  e escrevendo cada vetor  $|\psi_k\rangle$  nessa base, encontra-se os coeficientes  $c_{ij}$  da representação matricial de  $\rho(t) = \sum_{ij} c_{ij} |i\rangle \langle j|$ . Como  $\rho$  é positivo, é possível diagonalizar a matriz dos coeficientes e encontrar uma base  $\{|i'\rangle\}$  de autovetores ortogonais de  $\rho$  onde sua representação é diagonal, todos os pesos são positivos e somam 1 pela preservação do traço:

$$\rho(t) = \sum_{i'} \lambda_{i'} |i'\rangle \langle i'|. \quad (2.18)$$

Nessa base espectral, os pesos  $\lambda_{i'}$  também podem ser interpretados como probabilidades do sistema físico estar em cada um dos estados  $|i'\rangle$  ao se fazer a estatística de ensemble do experimento. Mostrando assim que, apesar da decomposição de um estado misto  $\rho$  em diferentes estados puros como em (2.17) poder ter infinitos termos, sempre existe uma maneira bem definida de decompor um operador densidade em estados puros ortogonais quando o espectro não é degenerado. Como todo operador positivo de traço finito no espaço de Hilbert do sistema possui uma decomposição espectral e pode ser normalizado, podemos associar a cada operador desse tipo uma distribuição de probabilidades para os estados de um sistema físico. Por isso, conjunto dos operadores densidade  $\mathcal{D}(\mathcal{H})$  é formado por todos os elementos de  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$  positivos semidefinidos e de traço 1. Além disso, a soma de dois operadores densidade  $\rho = a_1 \rho_1 + a_2 \rho_2$  para  $a_1, a_2 \geq 0$  e  $a_1 + a_2 = 1$  é um novo operador densidade: é hermitiano, positivo semidefinido e tem traço igual a 1. Isso revela que operadores densidade formam um conjunto convexo, que é definido da seguinte forma: se  $\mathcal{S}$  é um conjunto convexo e  $\rho_1, \rho_2 \in \mathcal{S}$ , então  $p\rho_1 + (1-p)\rho_2 \in \mathcal{S}$ , onde  $0 \leq p \leq 1$ .

Os elementos da diagonal da representação matricial de  $\rho(t)$  são chamados populações do estado e os de fora da diagonal principal são as coerências. Ambos os valores são dependentes da base escolhida para a representação matricial. A população  $\rho_{nn} = \langle n | \rho | n \rangle$  representa a probabilidade do sistema ser medido no estado  $|n\rangle$ . E as coerências representam quanto o sistema pode sofrer interferência.

Quando o mesmo estado  $|\psi\rangle$  pode ser associado a todos os componentes do ensemble representado por  $\rho$ , dizemos que  $\rho = |\psi\rangle \langle \psi|$  é um estado puro. Para um estado puro, vale  $\rho^2 = \rho$  e  $Tr\{\rho^2\} = Tr\{\rho\} = 1$ . Tomando a base espectral de um operador densidade, vemos que  $Tr\{\rho^2\} = \sum_i \lambda_i^2$  onde  $\lambda_i$  são os autovalores do operador. Em vista disso, o maior valor desse traço será 1, quando o ensemble for puro, e o menor valor será

$1/\dim\mathcal{H}$  quando o sistema físico tiver igual probabilidade de estar em qualquer um dos estados possíveis.

Veremos a seguir que todas as previsões feitas com vetores de estado podem ser feitas com operadores densidade. Para uma dinâmica unitária, a descrição com um vetor  $|\psi\rangle$ , ou o operador densidade  $\rho(t) = |\psi\rangle\langle\psi|$  que associa o mesmo vetor de estado a todos os entes do ensemble é completamente equivalente. Mas para sistemas abertos, o uso de operadores densidade torna-se indispensável devido às novas características que emergem como consequência de termos acesso apenas a parte da informação do sistema total.

### 2.2.1 Generalização de evoluções unitárias para operadores densidade e estados mistos

Quando a evolução é unitária e o operador densidade representa um ensemble puro  $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ , é simples verificar que a equação

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \frac{1}{i\hbar}[H(t), \rho(t)] \quad (2.19)$$

é a generalização direta da equação de Schrödinger (2.8) para um vetor. Essa equação é chamada equação de Lioville-von Neumann. Ela corresponde exatamente à derivada de  $\rho(t) = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle\langle\psi(t_0)|U^\dagger(t, t_0)$ , onde  $U(t, t_0)$  é a solução de (2.8). Como consequência, a evolução unitária de um estado misto será

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \sum_k p_k \frac{d}{dt}\rho_k(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_k p_k [H(t), \rho_k(t)]. \quad (2.20)$$

onde usamos que os pesos  $p_k$  são constantes quando a evolução é unitária. O resultado dessa equação é um estado em  $t$  que é exatamente a mistura estatística da evolução de cada um dos estados  $\rho_k(t_0)$  com os pesos iniciais:  $\rho(t) = \sum_k p_k \rho_k(t)$ , como esperado se temos uma incerteza clássica associada ao estado inicial. Podemos escrever a solução dessa equação para um operador densidade qualquer como

$$\rho(t) = U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0) = \mathcal{U}(t, t_0)\rho(t_0), \quad (2.21)$$

sendo  $\mathcal{U}(t, t_0)(\cdot) \equiv U(t, t_0)(\cdot)U^\dagger(t, t_0)$ .

O valor médio de um observável, dado por  $\langle A \rangle(t) = \langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle$ , é exatamente igual a

$$\langle A \rangle(t) = \text{Tr}\{\rho(t)A\} = \text{Tr}\{|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|A\} \quad (2.22)$$

quando  $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ , o que é facilmente verificado escolhendo uma base ortogonal em que um dos vetores seja  $|\psi(t)\rangle$ . Considerando uma mistura estatística, esse valor deve ser uma média dos valores obtidos para cada  $\rho_k(t)$  com pesos correspondentes a  $p_k$  (parcela de todos os estados do ensemble que contribuem com esse valor para a média final). É exatamente o que obtemos da equação acima para  $\rho(t) = \sum_k p_k \rho_k(t)$ :

$$\langle A \rangle(t) = \text{Tr}\{\rho(t)A\} = \sum_k p_k \text{Tr}\{\rho_k(t)A\} \quad (2.23)$$

Pensando na probabilidade  $\mathcal{P}(a_n)$  associada a uma medida projetiva:

$$\mathcal{P}(a_n) = \langle \psi(t) | P_n | \psi(t) \rangle, \quad (2.24)$$

teremos

$$\mathcal{P}(a_n) = \text{Tr}\{\rho(t)P_n\} \quad (2.25)$$

para ensembles. Analogamente ao raciocínio utilizado em (2.23) para a média de um operador.

### 2.3 Operador densidade reduzido

Se olhamos para sistemas abertos como parte de um sistema total unitário, precisamos entender como obter as previsões matemáticas das medidas feitas nesse subsistema acessível. Retomando as discussões sobre estados de sistemas compostos, vamos pensar em como calcular probabilidades associadas a operadores que atuam em apenas um subespaço de sistemas desse tipo.

A média de um operador  $\tilde{A}^{(1)} = A^{(1)} \otimes I^{(2)}$  que atua apenas no subespaço  $\mathcal{H}_1$  é dada por

$$\langle \tilde{A}^{(1)} \rangle = \text{Tr}\{\rho(t)\tilde{A}^{(1)}\} \quad (2.26)$$

Realizando o traço através de uma base de  $\mathcal{H}$  que é dada por  $|i^{(1)}\rangle |j^{(2)}\rangle$  onde  $\{|i^{(1)}\rangle\}$  e  $\{|j^{(2)}\rangle\}$  são bases de  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$ , respectivamente, encontramos:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{A}^{(1)} \rangle &= \text{Tr}\{\rho(t)\tilde{A}^{(1)}\} = \sum_{ij} \langle i^{(1)} | \langle j^{(2)} | \rho(t) A^{(1)} \otimes I^{(2)} | i^{(1)} \rangle | j^{(2)} \rangle = \\ &= \sum_{ij} \sum_{kl} \langle i^{(1)} | \langle j^{(2)} | \rho(t) | k^{(1)} \rangle | l^{(2)} \rangle \langle k^{(1)} | \langle l^{(2)} | A^{(1)} \otimes I^{(2)} | i^{(1)} \rangle | j^{(2)} \rangle = \\ &= \sum_{ij} \sum_{kl} \langle i^{(1)} | \langle j^{(2)} | \rho(t) | k^{(1)} \rangle | l^{(2)} \rangle \langle k^{(1)} | A^{(1)} | i^{(1)} \rangle \delta_{jl} = \\ &= \sum_{ijk} \langle i^{(1)} | (\langle j^{(2)} | \rho(t) | j^{(2)} \rangle) | k^{(1)} \rangle \langle k^{(1)} | A^{(1)} | i^{(1)} \rangle \quad (2.27) \end{aligned}$$

A operação  $\text{Tr}_2\{\rho(t)\} = \sum_j \langle j^{(2)} | \rho(t) | j^{(2)} \rangle$  é um traço parcial de  $\rho(t)$  apenas no espaço  $\mathcal{H}_2$ , resultando em um operador  $\text{Tr}_2\{\rho(t)\} = \rho_1(t) \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1)$  pertencente ao apenas ao outro subespaço. Substituindo  $\sum_k |k^{(1)}\rangle \langle k^{(1)}| = I^{(1)}$  na última equação ficamos com

$$\langle \tilde{A}^{(1)} \rangle = \sum_i \langle i^{(1)} | \rho_1(t) A^{(1)} | i^{(1)} \rangle = \text{Tr}_1\{\rho_1(t)A^{(1)}\} \quad (2.28)$$

o mesmo procedimento pode ser tomado por uma medida como (2.25), já que a equação para a probabilidade dessa medida é uma média do projetor  $P_n$ . Então o operador  $\rho_1(t)$  obtido através do traço parcial é exatamente o operador que faz o papel do operador densidade  $\rho(t)$  para o sistema reduzido 1. Esse operador recupera precisamente os valores de todas as medidas que podem ser feitas nesse subsistema e tem características de operador densidade do espaço  $\mathcal{H}_1$ : é possível mostrar que é positivo semidefinido e de traço 1.

Por isso, para cada subsistema de um sistema composto, associamos o operador densidade resultante do traço em todos os graus de liberdade que não são desse subsistema de interesse. De forma semelhante, poderíamos ter encontrado o operador  $\rho_2(t)$  que dá todas as probabilidades associadas ao espaço  $\mathcal{H}_2$  pelo traço no espaço  $\mathcal{H}_1$ :  $\rho_2(t) = Tr_1\{\rho(t)\}$ .

Quando o sistema total é dado por

$$\rho(t) = \rho_1(t) \otimes \rho_2(t) \quad (2.29)$$

dizemos que o estado é um estado produto. É importante notar que, na maioria dos casos, isso não será satisfeito. Se um estado é produto, cada um dos operadores densidade em (2.29) associado a um subespaço é justamente o obtido pelo traço parcial  $\rho_1(t) = Tr_2\{\rho(t)\} = \rho_1(t)Tr_2\{\rho_2(t)\}$ . Mas a recuperação das medidas em um único subsistema através do traço parcial é válida mesmo para estados mais gerais, pois não supomos essa característica para encontrar (2.28).

Um operador densidade genérico de um sistema composto pode ser escrito como

$$\rho(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_B(t) + \chi(t) \quad (2.30)$$

onde  $\chi(t)$  é o operador de correlação e é dado por  $\rho(t) - Tr_B\{\rho(t)\} \otimes Tr_S\{\rho(t)\}$ . Pela definição, verificamos que  $\chi(t)$  é sempre um operador hermitiano e de traços total e parciais nulos  $Tr\{\chi(t)\} = Tr_B\{\chi(t)\} = Tr_S\{\chi(t)\} = 0$ .

### 2.3.1 Efeitos em estados reduzidos

Constatamos que é possível associar um operador densidade a uma parte de um sistema total fechado através do traço parcial. Agora, confirmaremos que o formalismo de operadores densidade para subsistemas não é apenas possível, mas também necessário. Para revelar esse fato, tomamos um estado puro para o sistema total

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |a_i^{(1)} b_i^{(2)}\rangle \quad (2.31)$$

onde  $\{|a_i^{(1)}\rangle\}$  e  $\{|b_i^{(2)}\rangle\}$  são bases de  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$ . Essa decomposição é sempre possível para um estado puro bipartido e corresponde à decomposição de Schmidt. Nessas mesmas bases, os operadores densidade reduzidos serão diagonais e representam estados mistos sempre que o vetor global for um estado emaranhado (sempre que o somatório for não trivial). Por exemplo, para o sistema 1:

$$\rho_1 = \sum_i |c_i|^2 |a_i^{(1)}\rangle \langle a_i^{(1)}|. \quad (2.32)$$

Essa igualdade atesta que as probabilidades associadas a medidas nos subsistemas terão características de estados mistos que, como já discutimos anteriormente, não podem ser recuperadas por vetores de estado. Ainda que tenhamos um estado inicial puro e não

emaranhado para o universo, a dinâmica unitária poderá criar emaranhamento entre os subsistemas se estes interagirem entre si, impedindo que as evoluções dos sistemas reduzidos sejam representadas por vetores.

Pensando sempre em um sistema aberto como parte de um universo fechado, somos capazes de estudar quais novas características esses sistemas adquirem em decorrência das propriedades do universo. Veremos mais para frente, que esses sistemas não precisam ter uma evolução unitária. Isso já é evidente aqui, devido ao fato de termos possibilidade de sair de um estado puro e chegar a um estado com características de mistura estatística - o que não é possível com transformações unitárias. Neste trabalho, estudamos as equações que tomam o lugar da equação de Liouville (2.19) quando a evolução do sistema não precisa ser mais unitária. Veremos que aparece a chamada não-linearidade da dinâmica. Discutiremos a origem e as implicações dessa não-linearidade e proporemos uma maneira específica de estudá-la e chegar a equações não-lineares que podem ser diretamente relacionadas ou comparadas às lineares exatas e bem conhecidas.





### 3 SUPEROPERADORES

Já verificamos por (2.21) que operadores densidade são evoluídos por  $\mathcal{U}(t, t_0)$ , um novo objeto matemático que é definido a partir da ação dos operadores  $U(t, t_0)$  e  $U^\dagger(t, t_0)$ . Operadores lineares que levam operadores a operadores são chamados superoperadores; como  $\mathcal{U}(t, t_0)$ , que leva  $\rho(t_0)$  em  $\rho(t)$ . Em sistemas abertos, todas as evoluções serão dadas por superoperadores porque são eles que atuam em operadores densidade. E, como vimos, o formalismo de operadores densidade torna-se necessário nesse contexto.

Uma evolução dada pelo superoperador definido em (2.21) é uma evolução unitária. Para compreender as características de superoperadores que evoluem sistemas abertos, precisamos primeiro saber identificá-las. Neste capítulo, apresentaremos as propriedades de superoperadores que aparecem com mais frequência nas evoluções de operadores densidade e suas derivadas.

#### 3.1 Propriedades básicas

Tomemos uma base  $\{F_j, j = 1, \dots, N^2\}$  no espaço de operadores lineares  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ ,  $\dim \mathcal{H} = N$ . Escolhemos essa base de tal forma que seus elementos são ortonormais de acordo com o produto de Hilbert-Schmidt  $Tr_S\{F_i^\dagger F_j\} = \delta_{ij}$ . Um superoperador linear  $V$  qualquer pode ser escrito em função dessa base como

$$V[\cdot] = \sum_{j,k=1}^{N^2} c_{j,k} F_j[\cdot] F_k^\dagger. \quad (3.1)$$

Os coeficientes  $c_{j,k}$  de um superoperador  $V$  linear em cada base ortonormal  $\{F_j, j = 1, \dots, N^2\}$  são únicos. Essa propriedade pode ser demonstrada a partir do produto interno de superoperadores dado por  $\langle V_1, V_2 \rangle = \sum_i^{N^2} Tr\{(V_1 G_i)^\dagger (V_2 G_i)\}$  onde  $\{G_j, j = 1, \dots, N^2\}$  é uma base ortonormal qualquer em  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$  (10). Usaremos a notação  $V\rho$  para representar a ação de  $V[\cdot]$  em  $\rho$ . O traço desse superoperador, quando aplicado a um operador linear  $\rho$  qualquer é dado por

$$Tr\{V\rho\} = Tr\left\{\sum_{j,k=1}^{N^2} c_{j,k} F_k^\dagger F_j \rho\right\}. \quad (3.2)$$

Para que  $V$  preserve o traço de todo operador linear  $\rho$  - propriedade que chamaremos por TP (*trace-preserving*)-, precisamos que  $Tr\{V\rho\} = Tr\{\rho\}$ . Pela relação (3.2), isso implica que

$$\sum_{j,k=1}^{N^2} c_{j,k} F_k^\dagger F_j = I \quad (3.3)$$

Enquanto um  $V$  que aniquila traço, que chamaremos por operador TA (*trace-annihilating*), deve obedecer

$$\sum_{j,k=1}^{N^2} c_{j,k} F_k^\dagger F_j = 0 \quad (3.4)$$

Para um superoperador linear  $V$  que preserva hermiticidade,  $(V\rho)^\dagger = V(\rho)$  precisa ser verdade sempre que  $\rho = \rho^\dagger$ . Denotaremos por HP (ou *hermitian-preserving*) os operadores que preservam hermiticidade. Sabemos que qualquer operador  $\rho$  (hermitiano ou não) pode ser escrito como

$$\rho = \frac{1}{2}(\rho + \rho^\dagger) + \frac{i}{2}(-i\rho + i\rho^\dagger) \equiv \frac{1}{2}\rho_1 + \frac{i}{2}\rho_2 \quad (3.5)$$

onde  $\rho_1 = (\rho + \rho^\dagger)$  e  $\rho_2 = (-i\rho + i\rho^\dagger)$  são hermitianos. Se aplicamos a  $\rho$  um superoperador  $V$  linear e que preserva hermiticidade, devemos encontrar

$$(V\rho)^\dagger = \left(\frac{1}{2}V\rho_1 + \frac{i}{2}V\rho_2\right)^\dagger = \frac{1}{2}(V\rho_1)^\dagger - \frac{i}{2}(V\rho_2)^\dagger = \frac{1}{2}V\rho_1 - \frac{i}{2}V\rho_2 = V(\rho^\dagger) \quad (3.6)$$

onde usamos que  $(V\rho')^\dagger = V(\rho')$  quando  $\rho'$  é hermitiano na penúltima passagem. Então, para todo  $V$  linear e HP, deve valer  $(V\rho)^\dagger = V(\rho^\dagger)$ . Expandindo  $V$  em uma base  $\{F_i\}$  e usando que os coeficientes  $c_{j,k}$  são únicos, essa igualdade leva a

$$c_{j,k} = (c_{k,j})^* \quad (3.7)$$

### 3.1.1 Forma diagonal e forma pseudo-Kraus

Sabemos que o operador (3.1) pode ser escrito em diferentes bases. Para transicionar da base antiga  $\{F_i\}$  para uma nova base ortonormal  $\{G_i\}$ , devemos mudar também os coeficientes. Tomemos a matriz  $C$  de entradas  $(C)_{j,k} = c_{j,k}$ , uma transformação unitária  $U$  em  $C$  leva aos novos coeficientes  $(UCU^\dagger)_{j,k} = \sum_{i,l} u_{j,i} c_{i,l} u_{k,l}^*$ . A transformação correspondente nos operadores é dada por  $G_i = \sum_j F_j u_{i,j}^*$  e  $G_i^\dagger = \sum_j u_{i,j} F_j^\dagger$ , que corresponde a uma multiplicação do tipo  $G_i = (FU^\dagger)_i$  de uma matriz linha  $F$  de entradas  $F_i$  pela inversa da matriz da transformação  $U$  e, semelhantemente,  $G_i^\dagger = (UF^\dagger)_i$ .

Pela igualdade (3.7), sabemos que a matriz  $C$  de entradas  $(C)_{j,k} = c_{j,k}$  é uma matriz hermitiana sempre que  $V$  for um mapa que preserva hermiticidade (HP). Logo, para todo mapa HP, existe uma base que diagonaliza  $C$ , na qual o mapa é dado por

$$V[\cdot] = \sum_{i=1}^{N^2} \alpha_i E_i[\cdot] E_i^\dagger, \quad (3.8)$$

onde  $\alpha_i$  são coeficientes reais. Os operadores  $E_i$  são os operadores da base que diagonaliza  $C$ .

Qualquer mapa com a forma

$$V[\cdot] = \sum_i \beta_i K_i[\cdot] K_i^\dagger, \quad (3.9)$$

onde os operadores  $K_i$  são quaisquer e os coeficientes  $\beta_i$  são reais, é chamado mapa pseudo-Kraus e é um mapa que preserva hermiticidade (HP). Um mapa como (3.9) não possui uma quantidade máxima de operadores de Kraus  $K_i$ , mas a equação (3.8) mostra que  $N^2$  operadores são suficientes para escrever qualquer mapa que preserva hermiticidade na forma de pseudo-Kraus.

Quando aplicado a um operador linear  $\rho$  qualquer, temos

$$(V\rho)^\dagger = \sum_i \beta_i^* K_i \rho^\dagger K_i^\dagger = \sum_i \beta_i K_i \rho^\dagger K_i^\dagger = V\rho^\dagger. \quad (3.10)$$

Essa igualdade implica que o resultado da atuação do mapa  $V$  em um operador  $\rho$  é hermitiano sempre que  $\rho$  for hermitiano.

Qualquer mapa pseudo-Kraus, quando escrito em uma base  $\{F_j\}$  ortonormal, como (3.1), obedecerá a propriedade (3.7), que garante a preservação da hermiticidade. Usando a ortogonalidade dos elementos da base e expandindo cada  $K_i = \sum_j k_{j,i} F_j$ , notamos que  $k_{j,i} = \text{Tr}\{F_j^\dagger K_i\}$ . Na base  $\{F_j\}$  os coeficientes serão dados por

$$c_{i,j} = \sum_n \beta_n \text{Tr}\{F_i^\dagger K_n\} \text{Tr}\{F_j K_n^\dagger\} \quad (3.11)$$

que obedece  $c_{i,j} = c_{j,i}^*$ . Em resumo, todo mapa pseudo-Kraus é HP e todo mapa HP pode ser escrito como um mapa pseudo-Kraus através da diagonalização da matriz dos seus coeficientes. Quando  $\beta_n \geq 0, \forall n$ , podemos definir uma nova matriz  $(B)_{in} = k_{in} \sqrt{\beta_n}$ , e  $c_{i,j}$  será dado por  $c_{ij} = (BB^\dagger)_{ij}$ , o que implicará que a matriz dos coeficientes é positiva semidefinida.

### 3.1.2 Forma de Kraus - mapas CP

Um mapa linear  $V$  é dito positivo se preserva positividade. Isto é, se e somente se  $V\rho$  é positivo para todo  $\rho \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  positivo. Definimos um novo mapa linear  $V \otimes I_p : \mathcal{L}(\mathcal{H}) \otimes \mathcal{L}(\mathcal{H}_p) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}) \otimes \mathcal{L}(\mathcal{H}_p)$  onde  $I_p$  é identidade no espaço dos superoperadores que atuam em  $\mathcal{L}(\mathcal{H}_p)$  e  $\mathcal{H}_p$  é um espaço de Hilbert de dimensão  $p$ . O mapa linear  $V : \mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$  é completamente positivo se e somente se  $V \otimes I_p$  é positivo para todo  $p$  inteiro positivo. Chamaremos mapas completamente positivos por CP.

Pela definição (2.7) de operadores positivos, não é difícil verificar que mapas como

$$V[\cdot] = \sum_i \gamma_i K_i [\cdot] K_i^\dagger, \quad (3.12)$$

onde  $\gamma_i \geq 0, \forall i$ , preservam positividade. Para cada  $i$  no somatório, e um vetor qualquer  $|\psi\rangle$ , podemos definir  $|\psi_i\rangle \equiv K_i^\dagger |\psi\rangle$ . Como os  $\gamma_i$  são positivos,  $\langle \psi_i | \rho | \psi_i \rangle \geq 0, \forall |\psi_i\rangle$  implica em  $\langle \psi | V(\rho) | \psi \rangle \geq 0 \quad \forall |\psi\rangle$ . Em particular, como  $\gamma_i \geq 0, \forall i$ , podemos definir novos operadores  $W_i = \sqrt{\gamma_i} K_i$  e reescrever  $V$  como:

$$V[\cdot] = \sum_i W_i [\cdot] W_i^\dagger. \quad (3.13)$$

Disso, vemos que (3.12) não é simplesmente um mapa positivo, mas completamente positivo. A composição de  $V$  com a identidade de um espaço  $\mathcal{L}(\mathcal{H}_p)$  pode novamente ser escrita como (3.13):

$$V \otimes I_p[\cdot] = \sum_i (W_i \otimes I_p)[\cdot](W_i^\dagger \otimes I_p) \quad (3.14)$$

que garante a positividade de  $V \otimes I_p$ .

Chamamos a decomposição (3.13) por decomposição de Kraus. Observe que os operadores  $W_i$  não precisam ser ortogonais entre si para que  $V$  seja um mapa CP (completamente positivo), mas sempre é possível reescrever cada operador  $K_i$  de um mapa CP em uma base ortonormal  $\{F_i\}$  e diagonalizar a matriz dos coeficientes para encontrar uma decomposição de Kraus com operadores ortogonais.

$$V[\cdot] = \sum_i \beta_i G_i[\cdot]G_i^\dagger. \quad (3.15)$$

$G_i$  é a base que diagonaliza  $V$  e  $\beta_i$  são os autovalores da matriz dos coeficientes. Calculando os elementos da diagonal da matriz dos coeficientes na base  $\{G_i\}$  com a equação (3.11), é direto verificar que  $\beta_i \geq 0$ ,  $\forall i$ . Como era esperado pelo que verificamos no final da seção anterior.

### 3.2 De um mapa HPTP a um mapa HPTA

Tomamos uma base de operadores ortonormais  $\{F_j, j = 1, \dots, N^2\}$  com  $F_{N^2} = I/\sqrt{N}$ . Para que a base seja ortonormal, a escolha de um operador proporcional à identidade implica que todos os demais  $F_j$  terão traço nulo. Chamaremos por HPTP um superoperador que preserva hermiticidade e traço e por HPTA um superoperador que preserva hermiticidade e aniquila traço. Agora, escrevemos nessa base um mapa HPTP que varia temporalmente:

$$V(t, t_0)[\cdot] = \sum_{j,k=1}^{N^2} c_{j,k}(t, t_0) F_j[\cdot]F_k^\dagger \quad (3.16)$$

Supondo que  $V(t, t_0)$  está bem definido para quaisquer dois instantes  $t$  e  $t_0$  e que a sua dependência no tempo é tal que o seguinte limite existe, definimos o superoperador

$$\mathfrak{L}(t) \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{V(t + \epsilon, t) - I}{\epsilon} \quad (3.17)$$

Como  $V$  e  $I$  são operadores que preservam traço, o novo operador  $\mathfrak{L}(t)$  definido acima é um operador que aniquila traço:

$$\begin{aligned} Tr\{\mathfrak{L}(t)\rho\} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{Tr\{V(t + \epsilon, t)\rho - I\rho\}}{\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{Tr\{V(t + \epsilon, t)\rho\} - Tr\{\rho\}}{\epsilon} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{Tr\{\rho\} - Tr\{\rho\}}{\epsilon} = 0. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Além disso, como  $V(t, t_0)$  e  $I$  são operadores HP, o novo operador definido por (3.17) também preservará hermiticidade :

$$(\mathfrak{L}(t)\rho)^\dagger = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{(V(t + \epsilon, t)\rho)^\dagger - \rho^\dagger}{\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{V(t + \epsilon, t)\rho^\dagger - \rho^\dagger}{\epsilon} = \mathfrak{L}(t)\rho^\dagger. \quad (3.19)$$

Sendo assim, o limite (3.17) define um mapa HPTA a partir de um mapa HPTP  $V(t, t_0)$ .

### 3.2.1 Propriedades $\mathfrak{L}(t)$ a partir dos coeficientes

Substituindo (3.16) em (3.17):

$$\mathfrak{L}(t)[\cdot] = \sum_{j,k=1}^{N^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{c_{j,k}(t + \epsilon, t) F_j[\cdot] F_k^\dagger - I[\cdot]}{\epsilon} \quad (3.20)$$

Lembrando que  $F_{N^2} = I/\sqrt{N}$  e considerando que a base de operadores independente do tempo, definimos novos coeficientes

$$a_{N^2, N^2}(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{c_{N^2, N^2}(t + \epsilon, t) - N}{\epsilon} \quad (3.21)$$

$$a_{j, N^2}(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{c_{j, N^2}(t + \epsilon, t)}{\epsilon}, \quad j = 1, \dots, N^2 - 1 \quad (3.22)$$

$$a_{j,k}(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{c_{j,k}(t + \epsilon, t)}{\epsilon}, \quad j, k = 1, \dots, N^2 - 1 \quad (3.23)$$

Como  $V(t, t_0)$  é HP, seus coeficientes obedecem  $c_{j,k}(t, t_0) = c_{k,j}^*(t, t_0)$ . Com isso, temos

$$a_{j,k}^*(t) = a_{k,j}(t), \quad j, k = 1, \dots, N^2 \quad (3.24)$$

A partir dos novos coeficientes definidos e da relação acima, escrevemos

$$\mathfrak{L}(t)[\cdot] = \sum_{j,k=1}^{N^2} a_{j,k}(t) F_j[\cdot] F_k^\dagger \quad (3.25)$$

onde a relação (3.24) implica que  $\mathfrak{L}(t)$  é HP.

Agora, analisamos como  $\mathfrak{L}$  atua no traço de um operador. Usaremos a notação de derivação  $\dot{c}_{j,k}(t, t)$  para indicar uma derivação em relação à primeira entrada da função  $\dot{c}_{j,k}(t, t) = \left. \frac{d}{dt'} (c_{j,k}(t', t)) \right|_{t'=t}$ . Os coeficientes do mapa como funções do tempo podem ser aproximados por

$$c_{j,k}(t + \epsilon, t) = c_{j,k}(t, t) + \epsilon \dot{c}_{j,k}(t, t) + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (3.26)$$

Quando o limite (3.17) existe,  $V(t, t) = I$ . Isso significa que o mapa (3.16) toma a forma

$$V(t, t)[\cdot] = I[\cdot]I = N F_{N^2}[\cdot] F_{N^2}^\dagger \quad (3.27)$$

sabendo que os coeficientes na base  $\{F_i\}$  são únicos, isso implica que  $c_{N^2, N^2}(t, t) = N$  e  $c_{j,k}(t, t) = 0$  para qualquer outro par  $(j, k)$ . A partir dessas informações, percebemos que cada  $a_{j,k}(t)$  definido anteriormente resulta em

$$a_{j,k}(t) = \dot{c}_{j,k}(t, t), \quad j, k = 1, \dots, N^2. \quad (3.28)$$

Ou, colocado de outra forma, o limite (3.17) resultará em

$$\mathfrak{L}[\cdot] = \sum_{j,k=1}^{N^2} \dot{c}_{j,k}(t, t) F_j[\cdot] F_k^\dagger \quad (3.29)$$

que é, na realidade, a derivada (em relação à primeira entrada) do mapa  $V(t, t)$  definido em (3.16).

A propriedade TP de  $V$  exige que

$$\sum_{j,k=1}^{N^2} c_{j,k}(t, t_0) F_k^\dagger F_j = I. \quad (3.30)$$

Consequentemente,

$$\sum_{j,k=1}^{N^2} \dot{c}_{j,k}(t, t_0) F_k^\dagger F_j = 0. \quad (3.31)$$

Dessa maneira, vemos que  $\mathfrak{L}$  dado por (3.29) aniquila o traço de todos os operadores lineares em que atua.

### 3.3 Mapa HPTA na forma de Lindblad

Escolhemos novamente uma base de operadores ortonormais  $\{F_j, j = 1, \dots, N^2\}$  com  $F_{N^2} = I/\sqrt{N}$ . Agora, escrevemos um mapa HPTA genérico nessa base:

$$\mathfrak{L}(t)[\cdot] = \sum_{j,k=1}^{N^2} a_{j,k}(t) F_j[\cdot] F_k^\dagger. \quad (3.32)$$

Esse  $\mathfrak{L}$  pode ser, por exemplo, um operador construído a partir do limite de um operador HPTP como em (3.17), mas isso não é necessário. As únicas exigências são que satisfaça (3.4) para aniquilar traço e (3.7) para preservar hermiticidade. Todos os passos que serão feitos para chegar à equação na forma de Lindblad são válidos, inclusive, para uma base de operadores ortogonais dependentes do tempo, desde que mantenha o elemento  $F_{N^2} = I/\sqrt{N}$  constante.

Para seguir, abrimos o somatório de  $\mathfrak{L}(t)$  em diferentes termos

$$\begin{aligned} \mathfrak{L}(t)[\cdot] = & \frac{a_{N^2, N^2}(t)}{N} I[\cdot] I + I[\cdot] \sum_{j=1}^{N^2-1} \frac{a_{j, N^2}^*(t)}{\sqrt{N}} F_j^\dagger + \\ & \sum_{j=1}^{N^2-1} \frac{a_{N^2, j}(t)}{\sqrt{N}} F_j[\cdot] I + \sum_{j,k=1}^{N^2-1} a_{j,k}(t) F_j[\cdot] F_k^\dagger. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Definindo os novos operadores

$$F(t) = \sum_{j=1}^{N^2-1} \frac{a_{j, N^2}(t)}{\sqrt{N}} F_j \quad (3.34)$$

$$G(t) = \frac{a_{N^2, N^2}(t)}{2N} I + \frac{1}{2} (F^\dagger(t) + F(t)) \quad (3.35)$$

$$H(t) = \frac{1}{2i} (F^\dagger(t) - F(t)) \quad (3.36)$$

chegamos a uma equação com a forma

$$\mathfrak{L}(t)[\cdot] = -i[H(t), \cdot] + \{G(t), \cdot\} + \sum_{j,k=1}^{N^2-1} a_{j,k}(t) F_j[\cdot] F_k^\dagger, \quad (3.37)$$

na qual  $\{A, B\} = AB + BA$  é o anticomutador de  $A$  e  $B$ . Note que, para escrever a igualdade acima, usamos que  $a_{j,k} = a_{k,j}^*$ , já que  $\mathfrak{L}$  é HP (preserva hermiticidade). Como  $\mathfrak{L}(t)$  é um mapa que aniquila traço, teremos a seguinte igualdade para qualquer operador densidade  $\rho$  no qual atuar

$$\text{Tr}\{\mathfrak{L}(t)\rho\} = 0. \quad (3.38)$$

Pela propriedade cíclica do traço, sabemos que o traço do comutador em (3.41) aplicado a qualquer operador linear zera. Portanto, temos

$$\text{Tr} \left[ \left( 2G(t) + \sum_{j,k=1}^{N^2-1} a_{j,k}(t) F_k^\dagger F_j \right) \rho \right] = 0 \quad (3.39)$$

para todo  $\rho$ , o que implica em

$$G(t) = -\frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^{N^2-1} a_{j,k}(t) F_k^\dagger F_j \quad (3.40)$$

e, por fim,

$$\mathfrak{L}(t)[\cdot] = -i[H(t), \cdot] + \sum_{j,k=1}^{N^2-1} a_{j,k}(t) \left( F_j[\cdot] F_k^\dagger - \frac{1}{2} \{F_k^\dagger F_j, [\cdot]\} \right) \quad (3.41)$$

que é um superoperador na forma de Lindblad. Assim, mostramos que qualquer operador HPTA (preserva hermiticidade e aniquila traço) pode ser escrito na forma acima. Adicionalmente, qualquer operador na forma (3.41) é HPTA desde que  $a_{j,k} = a_{k,j}^*$  para cada par  $(j, k)$  e  $H(t)$  seja hermitiano. Chamamos o comutador de termo unitário por possuir uma forma análoga a um superoperador de Liouville (2.19) que corresponde a uma evolução unitária. O termo adicional, chamamos por dissipador ou termo dissipativo.

### 3.3.1 Diagonalização do termo dissipativo

Ao definirmos  $\mathfrak{L}$  em (3.32), assumimos mapa HP, o que significa que os coeficientes precisam obedecer  $a_{j,k} = a_{k,j}^*$  como em (3.7). Como já discutimos na seção 3.1.1, essa característica permite reescrever o somatório de (3.41) em uma base diagonal  $\{G_j\}$ . Nessa nova base, o somatório fica

$$\mathcal{D}[\cdot] = \sum_{j=1}^{N^2-1} \beta_j(t) \left( G_j[\cdot] G_j^\dagger - \frac{1}{2} \{G_j^\dagger G_j, [\cdot]\} \right) \quad (3.42)$$

onde  $\beta_i$  são os autovalores da matriz  $A$  de entradas  $(A)_{j,k} = a_{j,k}$  e dimensão  $(N^2 - 1)$ . Perceba que os elementos  $\{G_j\}$  da nova base que aparecem em (3.42) são combinações lineares apenas dos elementos de  $\{F_j\}$  que possuem traço nulo. Então  $\mathcal{D}$  continua sendo dado apenas por operadores de traço nulo mesmo após a diagonalização. O hamiltoniano da equação (3.36) em conjunto termo dissipativo diagonalizado definem a representação canônica das equações na forma de Lindblad.

Quando  $\mathfrak{L}$  é a derivada definida em (3.17) de um mapa  $V(t, t_0)$  completamente positivo (CP) para todo  $t$  e  $t_0$ , os coeficientes de  $\mathfrak{L}$ ,  $a_{j,k}(t)$ ,  $j, k = 1, \dots, N^2 - 1$ , definidos pelo limite (3.23) formarão uma matriz positiva semidefinida como consequência da positividade da matriz  $C$  de entradas  $c_{j,k}(t, t_0)$ . Apesar de  $c_{j,k}(t, t_0)$ ,  $j, k = 1, \dots, N^2 - 1$  equivaler apenas à projeção de  $C$  em um subespaço, é possível usar a definição (2.7) para provar que a projeção de  $C$  em qualquer subespaço também é positiva semidefinida. Por isso, uma diagonalização do termo dissipativo deve resultar em  $\beta_j(t)$  positivos para todo  $t$  quando  $\mathfrak{L}$  é derivado a partir de um superoperador  $V(t, t_0)$  completamente positivo para todo par de instantes. (19, 20)

### 3.3.2 Arbitrariedade na separação

É importante notar que a separação empregada na seção anterior para o termo unitário e dissipativo de  $\mathfrak{L}(t)$  será inalterada para um mesmo superoperador, ainda que a base usada para a derivação seja diferente. Pelo produto interno de superoperadores, é possível mostrar que dois superoperadores na base  $\{F_i\}$  adotada anteriormente  $\Gamma_{ij}[\cdot] = F_i[\cdot]F_j^*$  e  $\Gamma_{kl}[\cdot] = F_k[\cdot]F_l^*$  são linearmente independentes e ortogonais. O operador  $F(t)$  definido em (3.34) é obtido através da projeção de  $\mathfrak{L}(t)$  no subespaço formado por todos os superoperadores  $\Gamma_{iN^2}[\cdot] = F_i[\cdot]F_{N^2}^*$  onde  $i = 1, 2, \dots, N^2 - 1$ . E o termo dissipativo é definido pela projeção de  $\mathfrak{L}(t)$  no subespaço formado por todos os superoperadores  $\Gamma_{ij}[\cdot] = F_i[\cdot]F_j^*$  onde  $i, j = 1, 2, \dots, N^2 - 1$ . O restante segue das propriedades HPTA de  $\mathfrak{L}(t)$ . Como essas projeções independem de base, o desmembramento que resulta em (3.41) também independe quando for obtido por essa mesma receita.

Porém, o superoperador  $\mathfrak{L}(t)$  não precisa ser alcançado sempre dessa maneira e a separação entre as contribuições que vão para o comutador e as que vão para o somatório não é única. Por exemplo, uma opção indicada em (21) é a troca na forma diagonal de  $G_j(t)$  por  $G_j(t) - \alpha_j(t)I$  e  $H(t)$  por  $H(t) + \sum_j \frac{\beta_j(t)}{2i}(\alpha_j(t)G_i(t)^\dagger - \alpha_j^*(t)G_j(t))$ . Que mantém a forma de Lindblad, mas muda cada um dos termos. Outra opção é usar a forma diagonal  $\mathfrak{L}(t)[\cdot] = \sum_j \gamma_j E_j[\cdot]E_j^\dagger$  e, sabendo que  $\sum_j \gamma_j E_j^\dagger E_j = 0$  é satisfeito pelo mapa aniquilar traço, escrever

$$\mathfrak{L}(t)[\cdot] = \sum_j \gamma_j \left( E_j[\cdot]E_j^\dagger - \frac{1}{2}\{E_j^\dagger E_j, [\cdot]\} \right). \quad (3.43)$$

Que é uma separação que toma o hamiltoniano como nulo. Isso mostra que é possível escolher qualquer  $H$  hermitiano e obter uma equação na forma de Lindblad, porque o



dissipador definido como  $\mathcal{D}(\cdot) = i[H, \cdot] + \mathfrak{L}(\cdot)$  é HPTA sempre que  $\mathfrak{L}$  é HPTA e  $H = H^\dagger$ .

### 3.3.3 Termo unitário como uma projeção

Vamos verificar que obter  $H(t)$  de (3.36) é análogo a tomar a projeção de  $\mathfrak{L}(t)$  em um superoperador do tipo

$$-i( H(\cdot)I - I(\cdot)H ) \quad (3.44)$$

onde  $H = H^\dagger$ . Ou, equivalentemente, tomar a os termos desse superoperador que podem ser escritos como

$$K(\cdot)I - I(\cdot)K \quad (3.45)$$

onde  $K = -K^\dagger = -iH$ . Para um superoperador  $A(\cdot)B^\dagger$ , obtemos a sua projeção em um subespaço formado por operadores do tipo  $K(\cdot)I$  através de

$$\text{Tr}\{IB^\dagger\}A(\cdot)I = \text{Tr}\{B^\dagger\}A(\cdot)I \quad (3.46)$$

para garantir  $K = -K^\dagger$ , tomamos a parte anti-hermitiana de  $\text{Tr}\{B^\dagger\}A$ :

$$\left( \text{Tr}\{B^\dagger\}A - \text{Tr}\{B\}A^\dagger \right) / 2. \quad (3.47)$$

Já conseguimos perceber que a contribuição é nula se  $A$  e  $B$  são ambos hermitianos. Se supomos  $A$  e  $B$  componentes de uma base ortogonal de operadores e exigimos que  $\mathfrak{L}(t)$  preserve hermiticidade, esse superoperador deve ser uma superoposição de  $aA(\cdot)B^\dagger$  e  $a^*B(\cdot)A^\dagger$ . Assim, a contribuição total dessas componentes para o termo unitário é

$$K_{AB} = \left( a\text{Tr}\{B^\dagger\}A - a^*\text{Tr}\{B\}A^\dagger + a^*\text{Tr}\{A^\dagger\}B - a\text{Tr}\{A\}B^\dagger \right) / 2. \quad (3.48)$$

Dessa igualdade, podemos verificar que a projeção do operador à esquerda (por exemplo  $A$  em  $A(\cdot)B^\dagger$ ) na identidade não contribui superoperador anti-hermitiano encontrado

$$a\text{Tr}\{B^\dagger\}\text{Tr}\{A\}I - a^*\text{Tr}\{B\}\text{Tr}\{A^\dagger\}I + a^*\text{Tr}\{A^\dagger\}\text{Tr}\{B\}I - a\text{Tr}\{A\}\text{Tr}\{B^\dagger\}I = 0 \quad (3.49)$$

Por isso, construir  $H(t)$  em (3.36) com os termos de  $\mathfrak{L}(t)$  da equação (3.32) que são da forma  $F_i(\cdot)I$  excluindo  $F_i = I/\sqrt{N}$  é equivalente a tomar toda a projeção de  $\mathfrak{L}(t)$  em um subespaço de superoperadores do tipo  $K(\cdot)I$  e selecionar a parte anti-hermitiana de  $K$ . A existência do termo  $I(\cdot)K$  que completa o comutador é consequência de  $\mathfrak{L}(t)$  preservar hermiticidade. E o restante pode ser seguido exatamente como nas seções anteriores para construir o termo dissipativo.

Será útil verificar o que podemos inferir sobre  $H(t)$  em decorrência da forma diagonal de um operador HP. Sabemos que todo operador HP pode ser escrito em uma forma de pseudo-Kraus (3.8)

$$\mathcal{G}[\cdot] = \sum_i g_i G_i[\cdot] G_i^\dagger \quad (3.50)$$

onde os  $g_i$  são todos reais. Dessa forma, obtemos o operador anti-hermitiano  $K$  que dá a contribuição unitária como

$$K = \sum_i g_i \left( Tr\{G_i^\dagger\}G_i - Tr\{G_i\}G_i^\dagger \right) / 2. \quad (3.51)$$

De onde se conclui que o termo unitário obtido por esse método será nulo se todos os operadores  $G_i$  que dão a forma diagonal do operador HPTA tiverem traço nulo ou forem hermitianos.

Por exemplo, sabemos que o termo dissipativo (3.42) deve ter projeção nula nesse termo unitário porque foi alcançado a partir de componentes de  $\mathfrak{L}(t)$  ortogonais aos que tem projeção não nula no subespaço que forma  $H \cdot I$ . Essa expectativa pode ser novamente confirmada a partir de (3.51). O termo

$$\sum_{j=1}^{N^2-1} \beta_j(t) \left( G_j[\cdot]G_j^\dagger \right) \quad (3.52)$$

tem projeção nula porque todos os operadores são ortogonais. E

$$\sum_{j=1}^{N^2-1} -\frac{1}{2}\beta_j(t) \left( G_j^\dagger G_j[\cdot]I + I[\cdot]G_j^\dagger G_j \right) \quad (3.53)$$

tem projeção nula porque  $-\frac{1}{2}\beta_j G_j^\dagger G_j$  e  $I$  são hermitianos.

Por isso, exigir que o termo dissipativo de um operador linear HPTA  $\mathfrak{L}(t)$  será escrito na forma de Lindblad apenas com operadores de traço nulo implica que a única arbitrariedade na definição de  $H(t)$  será por um termo proporcional à identidade. Esse termo não altera o resultado da ação de  $\mathfrak{L}(t)$  em nenhum operador quando adicionada ao comutador, mas também essa arbitrariedade pode ser eliminada exigindo que  $H(t)$  tenha traço nulo. Para qualquer  $H(t)$  encontrando, é possível substituí-lo por um novo operador  $H'(t) = H(t) - Tr\{H(t)\}I/N$  de traço nulo sem alterar a ação de  $\mathfrak{L}(t)$ . Com isso, entendemos que a representação canônica de um superoperador na forma de Lindblad definida pelo hamiltoniano da seção 3.3 e a diagonalização do dissipador da seção 3.3.1 corresponde a uma separação entre termo unitário e dissipativo que é garantida se o dissipador possui apenas operadores de traço nulo ou o hamiltoniano é obtido através da projeção aqui indicada.

### 3.3.4 Superoperador HPTA quando o mapa é inversível

Uma condição suficiente para a existência do mapa  $V(t, t_0)$  para todo instante  $t$  e  $t_0$  é que o mapa  $V(t, t_0)$  exista para todo  $t$  e um  $t_0$  inicial e seja inversível:

$$V(t_2, t_1) = V(t_2, t_0)V^{-1}(t_1, t_0) \quad (3.54)$$

Facilmente verificamos que a inversa de um mapa TP preserva traço:  $Tr\{V^{-1}(V\rho)\} = Tr\{\rho\} = Tr\{V\rho\}$ . E por (3.6) obtemos que a inversa de um mapa HP também preserva

hermiticidade  $(V^{-1}(V\rho))^\dagger = \rho^\dagger = V^{-1}(V\rho^\dagger) = V^{-1}(V\rho)^\dagger$ . Por isso, sabemos que o mapa (3.54) é um mapa HPTP.

Pela definição (3.17) e posteriormente comparando (3.29) e (3.16), notamos que  $\mathfrak{L}(t)$  é dado pela derivada de  $V(t, t)$  em relação à primeira entrada. Definindo  $\mathfrak{L}(t)$  pela derivada de  $V(t_2, t_1)$  em (3.54) em relação a  $t_2$  e tomando  $t_2 = t_1 = t$ , obtemos

$$\mathfrak{L}(t)[\cdot] = \frac{dV(t, t_0)}{dt} V^{-1}(t, t_0)[\cdot] \quad (3.55)$$

que é um operador HPTA sempre que  $V(t, t_0)$  for HPTP. Porque isso garante (3.54) também HPTP. A única propriedade de  $V(t, t_0)$  que comentamos na análise de  $\mathfrak{L}(t)$  e que não é garantida para a inversa é a positividade completa, que implica na positividade dos coeficientes do dissipador. É possível mostrar que a inversa de um mapa linear CPTP é CPTP se e somente se o mapa é unitário (19).

### 3.4 Mapas HPTP e HPTA a partir de dinâmicas físicas

Até aqui, estudamos as características que os mapas  $V(t, t_0)$  e os superoperadores  $\mathfrak{L}(t)$  derivados a partir deles podem adquirir. Agora, desejamos entender como esses mapas e superoperadores (e suas propriedades) emergem da descrição de sistemas fechados como possibilidades para representar a evolução de sistemas abertos. Podemos considerar que qualquer sistema aberto é um subsistema de um sistema total ao qual chamamos de universo. Se tomarmos esse universo grande o suficiente para que possamos considerá-lo isolado, sua evolução será unitária. Sabemos também que o estado do subsistema de interesse  $\rho_S$  pode ser obtido a cada instante ao traçar sobre todos os graus de liberdade do sistema total  $\rho_T$  que não são de interesse. Tais graus de liberdade são chamados de ambiente e os referenciamos pela da letra  $B$ , ou seja,

$$\rho_S(t) = Tr_B\{\rho_T(t)\}. \quad (3.56)$$

Como consideramos graus de liberdade o suficiente para que a dinâmica do sistema total seja de um sistema isolado, podemos escrever

$$\rho_S(t) = Tr_B\{U(t, t_0)\rho_T(t_0)U^\dagger(t, t_0)\} \quad (3.57)$$

O caminho mais comum a partir daqui é supor um estado inicial produto para o sistema total em  $t_0$   $\rho_T(t_0) = \rho_S(t_0) \otimes \rho_B(t_0)$ . Tomando a base espectral de  $\rho_B(t_0)$ ,  $\{|\alpha_i(t_0)\rangle\}$  ( $\rho_B(t_0) = \sum_j \alpha_j(t_0) |\alpha_j(t_0)\rangle \langle \alpha_j(t_0)|$ ) e sendo  $\alpha_i(t_0)$  os autovalores desse operador densidade, é possível escrever

$$\rho_S(t) = \sum_{i,j} \alpha_j(t_0) \langle \alpha_i | U(t, t_0) | \alpha_j \rangle \rho_S(t_0) \langle \alpha_j | U^\dagger(t, t_0) | \alpha_i \rangle \quad (3.58)$$

onde o traço é realizado através dos vetores de índice  $i$  e o operador densidade do ambiente foi reescrito através dos vetores de índice  $j$ . Lembrando que todos os autovalores  $\alpha_j(t_0)$  de

$\rho_B$  são positivos, definimos novos operadores  $K_{ij}(t, t_0) = \sqrt{\alpha_j(t_0)} \langle \alpha_i(t_0) | U(t, t_0) | \alpha_j(t_0) \rangle$  e ficamos com

$$\rho_S(t) = \sum_{i,j} K_{ij}(t, t_0) \rho_S(t_0) K_{ij}^\dagger(t, t_0) \quad (3.59)$$

Agora, percebemos que para qualquer  $\rho_S(t_0) \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_S)$  que tomarmos no instante inicial  $\rho_T(t_0) = \rho_S(t_0) \otimes \rho_B(t_0)$ , o mapa

$$V(t, t_0)[\cdot] \equiv \sum_{i,j} K_{ij}(t, t_0)[\cdot] K_{ij}^\dagger(t, t_0) \quad (3.60)$$

é o mapa que dá a evolução temporal desse estado. Ou seja, para  $V(t, t_0)$  construído dessa forma,  $V(t, t_0)\rho_S(t_0) = \rho_S(t) \quad \forall \rho_S(t_0) \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_S)$ . Como todo  $\rho_S(t)$  deve ser um operador densidade (positivo semidefinido e de traço 1),  $V(t, t_0)$  deve ser um operador positivo e TP. Características que são garantidas pelo fato de ser um mapa na forma de Kraus.

Nessa derivação, construímos tantos operadores quanto o tamanho do ambiente. Para um ambiente com muitos graus de liberdade, diversos operadores de Kraus serão formados. Mas sabemos que  $N^4$  superoperadores formam uma base do espaço de superoperadores do sistema reduzido, onde  $N$  é a dimensão do espaço de Hilbert desse sistema. Também vimos em (3.15) que é possível encontrar uma base que diagonaliza um superoperador na forma de Kraus, nessa base, apenas  $N^2$  superoperadores são suficientes para escrever a ação do mapa no operador densidade, o que corresponde a  $N^2$  operadores de Kraus. Isso significa que, independentemente do tamanho do ambiente com o qual o sistema está acoplado,  $N^2$  operadores de Kraus são suficientes para evoluir  $\rho_S(t_0)$ .

Como o sistema de interesse interage com o ambiente, o estado do ambiente influencia a sua dinâmica e essa contribuição deve estar presente no mapa que evolui o sistema. Percebemos que essa construção do mapa  $V(t, t_0)$  evidencia a dependência da dinâmica do estado reduzido  $\rho_S$  não só do operador de evolução temporal  $U(t, t_0)$ , mas também do estado do sistema  $\rho_B$  com o qual  $\rho_S$  interage. Afinal, os operadores  $K_{ij}(t, t_0)$  dependem dos autovalores  $\alpha_j$ . Para um estado inicial  $\rho'_B(t_0)$  diferente, os autovalores  $\alpha'_j$  também seriam diferentes e o estado final  $\rho_S(t_0) = V'(t, t_0)\rho_S(t_0)$  dado pelo novo mapa  $V'(t, t_0)$  mudaria.

### 3.4.1 Quando há correlação no estado inicial

Para um estado inicial qualquer, escrevemos  $\rho_T(t_0) = \rho_S(t_0) \otimes \rho_B(t_0) + \chi(t_0)$  onde  $\chi(t_0)$  é o operador que contém a informação sobre as correlações no instante inicial como definido em (2.30). No caso mais geral, não só o estado do ambiente, mas também as correlações influenciam no estado do sistema de interesse em um instante posterior.

Na seção anterior comentamos que o mapa  $V(t, t_0)$  deve variar de acordo com o estado  $\rho_B$  do ambiente com o qual o sistema interage. Agora, o fato do estado final  $\rho_S(t)$  também ser modificado dependendo do operador de correlação no estado inicial

sinaliza que o mapa  $V(t, t_0)$  também deve possuir uma dependência nesse operador. Uma tentativa de encontrar a forma explícita desse mapa seria seguir o caminho análogo ao feito em (3.4), mas generalizando para um estado qualquer. Tomamos um estado genérico para o universo no instante inicial  $\rho_T(t_0) = \rho_S(t_0) \otimes \rho_B(t_0) + \chi(t_0)$ :

$$\begin{aligned} \rho_S(t_1) &= Tr_B \left[ U(t_1, t_0) (\rho_S(t_0) \otimes \rho_B(t_0) + \chi(t_0)) U^\dagger(t_1, t_0) \right] = \\ & Tr_B \left[ U(t_1, t_0) (\rho_S(t_0) \otimes \rho_B(t_0)) U^\dagger(t_1, t_0) \right] + Tr_B \left[ U(t_1, t_0) (\chi(t_0)) U^\dagger(t_1, t_0) \right] = \\ & \mathcal{V}_{\rho_B}(t_1, t_0) \rho_S(t_0) + Tr_B \left[ U(t_1, t_0) \chi(t_0) U^\dagger(t_1, t_0) \right] \\ & \equiv V(t_1, t_0) \rho_S(t_0) \quad (3.61) \end{aligned}$$

O termo  $\mathcal{V}_{\rho_B}(t, t_0)$  que compõe o mapa  $V(t, t_0)$  pode ser construído exatamente como em (3.4) e portanto é linear em  $\rho_S(t_0)$  e CPTP. A dificuldade em encontrar essas mesmas características para  $V(t, t_0)$  vem do traço no ambiente do operador  $U(t_1, t_0) \chi(t_0) U^\dagger(t_1, t_0)$ . É importante notar que, apesar de  $Tr_B\{\chi(t_0)\} = Tr_S\{\chi(t_0)\} = 0$ , nada impede que a evolução desse operador tenha contribuições não nulas nos subsistemas  $B$  e  $S$  em instantes posteriores. Casos bastante específicos em que as correlações iniciais nunca terão influência nos estados reduzidos são, por exemplo, quando  $\chi(t_0)$  comuta com o operador de evolução temporal ou o hamiltoniano de interação é nulo  $H_I = 0$ . É direto verificar que a dependência do estado reduzido nas correlações é nula para o primeiro caso. No segundo caso, o operador de evolução temporal do universo pode ser separado em um termo relacionado a cada subsistema  $U(t, t_0) = U_S(t, t_0) \otimes U_B(t, t_0)$ , que implica em

$$\begin{aligned} Tr_B\{U(t_1, t_0) \chi(t_0) U^\dagger(t_1, t_0)\} &= U_S(t_1, t_0) Tr_B\{U_B(t_1, t_0) \chi(t_0) U_B^\dagger(t_1, t_0)\} U_S^\dagger(t_1, t_0) = \\ & U_S(t_1, t_0) Tr_B\{\chi(t_0)\} U_S^\dagger(t_1, t_0) = 0, \quad (3.62) \end{aligned}$$

pela propriedade cíclica do traço e  $Tr_B\{\chi(t_0)\} = 0$ . Revelando que as correlações nunca afetam a estatística de um sistema reduzido na ausência de interação. Além disso, a ausência de interação levará a dinâmicas unitárias para os operadores densidade reduzidos. Portanto,  $\rho_S(t)$  não apresentará os efeitos característicos de sistemas abertos. Em ambas as situações,  $V(t, t_0)$  iguala-se a  $\mathcal{V}_{\rho_B}(t, t_0)$  e recupera a linearidade em  $\rho_S(t_0)$  obtida como em (3.4). Porém, as circunstâncias de interesse físico em sistemas abertos em geral serão aquelas em que  $H_I \neq 0$ . E  $[U(t_1, t_0), \chi(t_0)] = 0$  só será satisfeito sob condições bastante específicas. Dessa maneira, mostra-se necessário verificar o impacto das correlações nos operadores densidades reduzidos.

Para atingir tal objetivo, vamos começar compreendendo algumas implicações da presença de  $\chi$ . Quando temos um estado produto  $\rho_T(t_0) = \rho_S(t_0) \otimes \rho_B(t_0)$ , qualquer combinação de  $\rho_S(t_0)$  e  $\rho_B(t_0)$  pode representar um estado físico. Já na presença de correlações, nem toda combinação de  $\chi(t_0)$ ,  $\rho_S(t_0)$  e  $\rho_B(t_0)$  resultará em um operador  $\rho_T(t_0)$  positivo semidefinido. Vamos examinar o exemplo do operador de correlação correspondente ao

estado total

$$\rho_T = \frac{1}{2}(|0^{(S)}0^{(B)}\rangle + |1^{(S)}1^{(B)}\rangle)(\langle 0^{(S)}0^{(B)}| + \langle 1^{(S)}1^{(B)}|). \quad (3.63)$$

O produto dos estados reduzidos resulta em

$$\rho_S \otimes \rho_B = \frac{1}{4}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) \otimes (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) \quad (3.64)$$

e o operar de correlação se iguala a

$$\begin{aligned} \chi &= \rho_T - \rho_S \otimes \rho_B = \\ &= \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 1| \otimes |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| \otimes |1\rangle\langle 0|) + \frac{1}{4}((|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|) \otimes (|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|)). \end{aligned} \quad (3.65)$$

Não é difícil verificar que  $\chi$  é hermitiano e  $Tr_S\{\chi\} = Tr_B\{\chi\} = 0$ . É evidente que o operador (3.63) formado pela soma de  $\chi$  e de (3.64) é um operador positivo semidefinido, diagonal em qualquer base ortogonal que tem  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0^{(S)}0^{(B)}\rangle + |1^{(S)}1^{(B)}\rangle)$  como componente. Porém, se combinamos  $\chi$  com um outro estado separável

$$\rho'_S \otimes \rho_B = \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0|) \otimes (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|), \quad (3.66)$$

o operador resultante dessa soma não obedecerá a condição (2.7) que define um operador positivo.

$$\langle 1^{(S)}0^{(B)}| \rho'_S \otimes \rho_B + \chi |1^{(S)}0^{(B)}\rangle = \langle 1^{(S)}0^{(B)}| \chi |1^{(S)}0^{(B)}\rangle = -\frac{1}{4} < 0 \quad (3.67)$$

Por isso, um mapa  $V(t, t_0)$  construído a partir de um estado inicial  $\rho_B(t_0)$  do ambiente e uma correlação  $\chi(t_0)$  não é compatível com qualquer estado inicial para o sistema de interesse  $\rho_S(t_0)$ . Quando tomamos um estado  $\rho_S \otimes \rho_B + \chi$  e trocamos  $\rho_S$  por um novo operador densidade arbitrário  $\rho'_S$ , ainda temos a hermiticidade e o traço preservados devido às características de cada operador, mas a positividade não é garantida.

Como cada mapa compatível com o sistema de interesse depende do próprio estado  $\rho_S(t_0)$  em questão, por vezes, chama-se esses mapas de não-lineares. Veremos nas seções seguintes que é possível construir superoperadores que governam a dinâmica de sistemas com correlações e são superoperadores lineares, como definidos em (2.5). A diferença para o caso em que não há correlações é que seu domínio de validade física será mais restrito. Possivelmente sendo um único estado no espaço de operadores densidade. A restrição do domínio físico de validade como consequência da influência das correlações na dinâmica reduzida já foi discutida em. (22) Construções alternativas também fazem uso de decomposições específicas do estado do universo, de forma que diferentes termos que formam o operador densidade reduzido possam ser evoluídos por mapas lineares que preservam positividade. (23,24) Ou também introduzem mapas afins (25) que, no entanto, são uma descrição equivalente à de mapas lineares para subsistemas de dimensão finita. (26)

Ao mesmo tempo que  $\chi(t_0)$  pode alterar  $\rho_S(t)$  e  $\rho_B(t)$ , o termo separável no instante inicial também pode contribuir para as correlações ao longo da dinâmica devido à interação entre os subsistemas. Essa característica não é tão relevante quando analisamos um mapa apenas a partir do instante inicial, mas é crucial para a análise de um mapa que conecta dois instantes quaisquer. Porque mostra que um estado separável em  $t_0$  não garante um mapa linear para qualquer instante posterior. Em resumo, o desmembramento do estado do sistema em termo separável e matriz de correlações em um instante  $t$  depende da evolução de ambos os operadores. As matriz  $\chi(t)$  podem surgir da evolução, tanto de  $\chi(t_0)$ , quanto de  $\rho_S(t_0) \otimes \rho_B(t_0)$  e o mesmo acontece para  $\rho_S(t) \otimes \rho_B(t)$ . A contribuição da correlação inicial na dinâmica de  $\rho_S(t)$  se reflete em uma grande dificuldade em construir um mapa  $V(t, t_0)$  linear. E o surgimento de correlações ao longo da dinâmica vindas do estado separável sinaliza essa mesma dificuldade em um instante posterior, mesmo quando ela não existe no instante inicial. O que, ao fim, recai em um problema para construir um superoperador exato  $\mathfrak{L}$  a partir dos mapas.

### 3.4.2 Condições gerais para a linearidade da dinâmica de um conjunto

Pela seção anterior, sabemos que em geral a dinâmica de dois estados reduzidos diferentes não será alcançada por um mesmo mapa linear, ainda que estejam associados a uma operação unitária idêntica no universo. Porém, é possível estudar sob quais condições um conjunto de estados do sistema reduzido tem sua dinâmica física obtida através de um único mapa linear  $\Phi_S$ . As propriedades que equivalem a essa linearidade são apresentadas em (27) com base no trabalho anterior (28) que já dava as condições suficientes. Para conhecê-las, usa-se o conceito de U-consistência. Consideramos um conjunto qualquer  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$  de possíveis estados iniciais do universo que evolui por uma transformação unitária  $U$ . Esse conjunto é U-consistente se, toda vez que for satisfeita a igualdade

$$Tr_B(\rho_{SBi}) = Tr_B(\rho_{SBj}) = \rho_S(t_0) \quad (3.68)$$

para dois elementos  $\rho_{SBi}(t_0)$  e  $\rho_{SBj}(t_0)$  de  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ , também valer a igualdade

$$Tr_B(U\rho_{SBi}U^\dagger) = Tr_B(U\rho_{SBj}U^\dagger). \quad (3.69)$$

Isto é, se o estado reduzido no instante inicial é o mesmo para dois estados de  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ , o estado reduzido após a evolução unitária também deve ser. A condição de U-consistência é essencial, porque garante que a dinâmica de um estado reduzido  $\rho_S(t_0)$  específico possa ser dada por  $\Phi_S(\rho_S(t_0))$  independentemente de esse estado ter sido obtido pelo traço parcial de  $\rho_{SBi}(t_0)$  ou  $\rho_{SBj}(t_0)$ . Não há como definir bem um mapa  $\Phi_S$  para os estados iniciais reduzidos se a U-consistência não é satisfeita para o conjunto  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$  do qual procedem. Os trabalhos aqui citados encontram que, se  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$  é convexo além de U-consistente, então existe um mapa  $\Phi_S$  que é linear, preserva traço e hermiticidade que evolui todos os estados do sistema de interesse  $\mathcal{S}_S(\mathcal{H}_S) = Tr_B\{\mathcal{S}(\mathcal{H})\}$  obtidos pelo traço parcial nos elementos

de  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ . Além disso, demonstram que todo mapa linear que evolui um conjunto estados do sistema de interesse está associado a um conjunto convexo e U-consistente de estados do sistema total.

Imaginamos um conjunto  $\mathcal{S}'_S(\mathcal{H}_S) = \{\rho_S^{(1)}, \rho_S^{(2)}, \dots, \rho_S^{(m)}\}$  de elementos linearmente independentes de  $\mathcal{S}_S(\mathcal{H}_S)$  ataravés dos quais se pode escrever qualquer estado desse último conjunto. Definimos um *assignment map*  $\Lambda_S$  de forma similar à definição usada em (29): um mapa linear que associa cada  $\rho_S^{(i)}$  a um estado  $\rho_{SB}^{(i)} = \Lambda_S(\rho_S^{(i)})$  de  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$  tal que  $Tr\{\rho_{SB}^{(i)}\} = \rho_S^{(i)}$ . Como qualquer estado reduzido pode ser escrito como  $\sum_i d_i \rho_S^{(i)}$ ,  $\Lambda_S$  é capaz de fazer essa associação para qualquer elemento de  $\mathcal{S}_S(\mathcal{H}_S)$ :

$$\Lambda_S\left(\sum_i d_i \rho_S^{(i)}\right) = \sum_i d_i \Lambda_S(\rho_S^{(i)}) = \sum_i d_i \rho_{SB}^{(i)}. \quad (3.70)$$

Mas a U-consistência de  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$  define uma equivalência entre todos os seus estados que resultam no mesmo operador reduzido. Se além de U-consistente,  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$  é convexo, o estado  $\sum_i d_i \rho_{SB}^{(i)}$  que  $\Lambda_S$  associa a  $\sum_i d_i \rho_S^{(i)}$  é equivalente a qualquer outro estado de  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$  com esse mesmo traço parcial. Com essas propriedades, é possível demonstrar que existe um mapa linear que evolui os estados de  $\mathcal{S}_S(\mathcal{H}_S)$  dado por

$$\Phi_S(\rho_S) = Tr_B\{U(\Lambda_S(\rho_S))U^\dagger\}. \quad (3.71)$$

A necessidade dessas condições de convexidade e U-consistência é demonstrada considerando que os elementos de um conjunto  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$  de estados do sistema total, que evoluem por uma operação unitária U, têm seus estados reduzidos evoluídos por um mapa linear  $\Psi_S$  tal que

$$\Psi_S(\rho_S) = \sum_{i=1}^m a_i \Psi_S(\rho_S^{(i)}) \quad (3.72)$$

onde  $\rho_S = \sum_{i=1}^m a_i \rho_S^{(i)}$  e cada  $\rho_S^{(i)} = Tr_B\{\rho_{SB}^{(i)}\}$ , sendo  $\rho_{SB}^{(i)} \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ . Como todos os estados reduzidos do conjunto são dados por um mapa idêntico, naturalmente  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$  é U-consistente. Usando que  $\Psi_S(\rho_S) = Tr_B\{U\rho_{SE}U^\dagger\}$  para cada  $\rho_S = Tr_B\{\rho_{SE}\}$  e  $\rho_{SE} \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$  em (3.72), obtemos

$$Tr_B\{U\rho_{SE}U^\dagger\} = \sum_{i=1}^m a_i Tr_B\{U\rho_{SE}^{(i)}U^\dagger\} = Tr_B\{U(\sum_{i=1}^m a_i \rho_{SE}^{(i)})U^\dagger\} \quad (3.73)$$

Por  $\rho_S = \sum_{i=1}^m a_i \rho_S^{(i)}$  sabemos que  $\rho_{SE}$  e  $\sum_{i=1}^m a_i \rho_{SE}^{(i)}$  só podem diferir por um operador Y tal que  $Tr_B\{Y\} = 0$ .

$$\rho_{SE} = \sum_{i=1}^m a_i \rho_{SE}^{(i)} + Y \quad (3.74)$$

Mas a equação (3.73) implica também que  $Tr_B\{UYU^\dagger\} = 0$ . E isso é suficiente para afirmar que o conjunto  $\tilde{\mathcal{S}}(\mathcal{H})$  de combinações convexas de elementos de  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$  é U-consistente (27).



Um caso trivial de um conjunto com U-consistência, é justamente aquele em que o estado total inicial é separável e fixamos o estado do banho como um  $\rho_B(t_0)$  específico. O conjunto convexo formado por todos os operadores do tipo  $\rho_S(t_0) \otimes \rho_B(t_0)$  onde  $\rho_S(t_0)$  é qualquer operador densidade do sistema reduzido está associado ao operador linear  $\Phi_S$  construído em (3.4). O outro exemplo de mapa linear que já salientamos é  $\Phi_S(\cdot) = U_S(\cdot)U_S^\dagger$  que é obtido quando não há interação entre o sistema e o ambiente. Para essa situação, o conjunto convexo associado a esse mapa linear é todo o conjunto de operadores densidade em  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_B$ . É possível mostrar que  $U$  formado apenas por unitárias locais é uma condição necessária para a U-consistência desse conjunto (28). Em geral, quanto mais complexa a evolução, mais restrito precisará ser o conjunto  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ .

### 3.4.3 Superoperador HPTA em dinâmicas físicas

Quando  $V(t, t_0)$  for o superoperador que dá a dinâmica de um estado inicial  $\rho(t_0)$ ,  $\rho(t) = V(t, t_0)\rho(t_0)$ , e o limite (3.17) existir,  $\mathfrak{L}(t)$  definido pelo limite resultará na derivada de  $\rho(t)$ :

$$\mathfrak{L}(t)[\rho(t)] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{(V(t + \epsilon, t) - I)\rho(t)}{\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\rho(t + \epsilon) - \rho(t)}{\epsilon} = \frac{d}{dt}\rho(t). \quad (3.75)$$

Enquanto o traço constante e igual a um é uma característica comum a todos os operadores densidade, as derivadas desses mesmos operadores possuem traço nulo. Isso é facilmente verificado por  $Tr\{\frac{d}{dt}\rho(t)\} = \frac{d}{dt}Tr\{\rho(t)\} = 0$ . Ao passo que a hermiticidade de  $\frac{d}{dt}\rho(t)$  pode ser verificada derivando  $\rho(t) = \sum_i \lambda_i(t) |\phi_i(t)\rangle \langle \phi_i(t)|$  na sua base espectral. Então temos os superoperadores  $V(t, t_0)$  que conectam operadores densidade e preservam hermiticidade e traço. Mas um superoperador que leva um operador densidade à sua derivada precisa preservar a hermiticidade e aniquilar o traço, como o que faz  $\mathfrak{L}(t)$  definido pela derivada de mapas como  $V(t, t_0)$ .

A forma de Lindblad foi apresentada inicialmente nos trabalhos (9) e (10) de forma independente especificamente para o caso de sistemas quânticos evoluídos por semigrupos dinâmicos - que se reflete na equação mestra pela ausência de dependência temporal dos operadores e positivities de todas as taxas para todos os instantes de tempo. O nome da equação, por vezes também chamada por *GKLS equation* faz menção aos autores destes trabalhos: Gorini, Kossakowski, Lindblad e Sudarshan.

Superoperadores HPTA na forma de Lindblad são amplamente usados para investigar características de sistemas abertos. Como uma grande vantagem dessa forma, temos a possibilidade de associar à dinâmica física um termo unitário e um dissipativo e, a partir daí, entender quais processos físicos causam certos tipos de efeitos como a conservação ou mudança de propriedades do sistema de interesse. Essas propriedades, por sua vez, podem ser desejáveis ou inconvenientes em certas aplicações práticas.

Dentre as classificações que se busca fazer sobre a evolução de sistemas quânticos abertos está a markovianidade. Esse é um conceito bem definido para dinâmicas estocásticas clássicas (30), mas em disputa quando se trata da definição quântica. Como a markovianidade clássica dá uma ideia do quanto a informação de estados passados altera a dinâmica atual, as principais definições quânticas se apoiam em medidas que podem ser interpretadas como perda ou ganho de algum tipo de informação. Em geral, entende-se como uma dinâmica markoviana quântica aquela em que essa medida decresce monotonicamente com o tempo. (31)

Uma das principais definições, a RHP, define markovianidade a partir da divisibilidade de mapas lineares CPTP. (19) Uma dinâmica markoviana será dada por uma família de mapas que obedecem  $V(t_2, t_0) = V(t_2, t_1)V(t_1, t_0)$  para quaisquer instantes tais que  $t_2 \geq t_1 \geq t_0$  e onde cada um desses mapas é linear e CPTP. Como já comentado na seção 3.3.1, uma consequência disso será a positividade de todas as taxas do termo dissipativo em sua forma diagonal para todos os instantes de tempo. O texto (19) dos autores dessa definição também mostra que a positividade dessas taxas é equivalente à composição, como mostrada aqui, de mapas CPTP para todo instante de tempo. As taxas de decaimento também oferecem um quantificador de não-markovianidade que a identifica mesmo quando outras testemunhas não equivalentes dessa quantidade não conseguem perceber a presença de taxas negativas. (5) Apesar de ser uma medida possível para qualquer dinâmica dada por um superoperador HPTA, a markovianidade RHP é definida para mapas cujo domínio físico de validade é todo o espaço  $\mathcal{D}(\mathcal{H}_S)$  de operadores densidade do sistema de interesse (veremos nos capítulos 5 e 6 casos de superoperadores HPTA com domínios de validade mais restritos que este). Quando um mesmo mapa completamente positivo dá a evolução física de vários estados distintos, ele provoca diminuição da probabilidade de distinguir dois desses estados com a melhor escolha possível de operadores de medição. (7) Assim, percebemos essa medida como um indicador de perda de informação.

A dificuldade em identificar as equações mestras para sistemas abertos em contextos diversos é traduzida também como um obstáculo para classificar markovianidade para essas dinâmicas com a definição RHP. Porém, mesmo definições que não exigem o conhecimento da equação mestra podem se sustentar em suposições semelhantes a respeito do domínio físico de validade dos mapas que evoluem o sistema reduzido e, por isso, impossibilitam a sua extensão direta para situações em que esse domínio não é tão abrangente. (32) Por sua vez, classificações que se apoiam nos superoperadores  $\mathcal{L}(t)$  que dão a dinâmica reduzida podem ser investigadas sempre que esse operador existe. Como veremos na seção 5.1 é sempre possível encontrar um operador  $\mathcal{L}(t)$  para qualquer dinâmica física. Independentemente do estado inicial, intensidade da interação e características do ambiente.

Além de markovianidade, na área de termodinâmica quântica utiliza-se o o termo

---

unitário de  $\mathfrak{L}(t)$  para definir energia interna de sistemas abertos. (8, 33) Consequentemente, quantidades como calor e trabalho também decorrem da identificação desses superoperadores. Ademais, a forma relativamente simples de superoperadores locais HPTA favorece o estudo do comportamento da entropia ao longo das dinâmicas. (34–36) Tanto as concepções de energia interna pelo termo unitário quanto a investigação de processos dissipativos e perda de informação por  $\mathfrak{L}(t)$  só podem ser generalizadas de maneira natural para sistemas quânticos quaisquer se identificarmos superoperadores HPTA locais adequados para essas evoluções.

Isso não é uma tarefa fácil. Costuma-se justificar o uso de superoperadores na forma de Lindblad para estados iniciais separáveis, acoplamento fraco e ainda as considerações de relações específicas entre as escalas do sistema e do ambiente, suposições que permitem o uso das aproximações de Born-Markov que discutiremos no capítulo 4. Mas essas considerações restringem enormemente as possibilidades de sistemas a serem estudados. Se queremos identificar quantidades básicas de todos os sistemas quânticos precisamos de formalismos mais gerais.



## 4 MÉTODOS PARA ENCONTRAR EQUAÇÕES MESTRAS

Comentaremos brevemente os principais métodos utilizados para derivar as equações mestras de sistemas abertos. Em geral esses métodos só resultam em equações do tipo Lindblad após uma série de aproximações. São métodos que proporcionam descrições da dinâmica de sistemas abertos sem a necessidade de prever ou conhecer toda a dinâmica do universo.

### 4.1 Aproximação de Born-Markov

O conjunto de aproximações mais comumente mencionado são as aproximações de Born-Markov. Associadas à aproximação secular (ou *rotating wave approximation* RWA no contexto de óptica), essas aproximações levam a uma equação mestra do tipo Lindblad sem dependência temporal. Os detalhes da derivação podem ser acompanhados em (20). Aqui vamos apenas retomar algumas passagens importantes que evidenciam as aproximações feitas e os resultados obtidos.

No tratamento de sistemas abertos, é comum o uso das equações na versão de interação, onde as contas se tornam mais simples e a evolução dos estados pode ser analisada diretamente em função da intensidade do acoplamento. Considere um sistema cuja evolução é dada pelo hamiltoniano  $H_S + H_B + H_I$ , onde  $H_S$  e  $H_B$  são os hamiltonianos do sistema e do ambiente, respectivamente e  $H_I$  é o hamiltoniano de interação entre ambos. Nessa versão, a equação de Liouville para o sistema total, que evolui unitariamente, é dada por

$$\dot{\rho}(t) = -i[H_I(t), \rho(t)]. \quad (4.1)$$

Tendo como solução

$$\rho(t) = \rho(0) - i \int_0^t ds [H_I(s), \rho(s)]. \quad (4.2)$$

Substituindo (4.2) no comutador de (4.1) e tomando o traço nos graus de liberdade do ambiente obtemos uma equação para o sistema de interesse  $\dot{\rho}_S(t) = Tr_B\{\dot{\rho}(t)\}$ . Além disso, assumindo que a interação e o estado inicial são tais que  $Tr_B[H_I(t), \rho(0)] = 0$ , somos levados a

$$\dot{\rho}_S(t) = - \int_0^t ds Tr_B[H_I(t), [H_I(s), \rho(s)]] \quad (4.3)$$

Agora, começamos a fazer considerações importantes. Na primeira restrição, tomamos o estado total como um estado inicialmente separável. Essa condição inicial em geral não é vista como um grande empecilho porque sempre é possível realizar no sistema

reduzido um conjunto completo de medidas que associe o seu estado a um único vetor. Consequência disso é que o estado total ao final das medições será um estado separável. É possível verificar que se o estado inicial é separável e  $\rho_B$  é um estado estacionário do banho, a condição  $Tr_B[H_I(t), \rho(0)] = 0$  pode ser sempre satisfeita desde que seja feito o deslocamento correto dos níveis de energia. (37) Além disso, supomos que o acoplamento entre o sistema e o ambiente é fraco, sendo o ambiente um reservatório com muitos graus de liberdade. Sob essas condições, imagina-se que a dinâmica do ambiente rapidamente irá suprimir as alterações provocadas nele pela interação. Por isso, considera-se que, com a condição de acoplamento fraco, podemos tomar o estado do ambiente como sendo um estado que não é significativamente afetado pela interação e o estado do sistema total como um estado separável a todo o instante, já que as correlações também devem ser rapidamente perdidas. É importante salientar que essa consideração é bastante forte, por exemplo, (38) mostra por simulação numérica para um oscilador harmônico amortecido que o estado total do sistema se distancia apreciavelmente de um separável conforme o tempo passa. Porém, considerar estado separável é uma estratégia útil para atingir a equação correta, cuja derivação é melhor justificada pelas técnicas de operadores de projeção, como veremos nas seções seguintes. Essa aproximação, chamado de aproximação de Born ou aproximação de acoplamento fraco pode ser representada pela seguinte relação:

$$\rho(t) \approx \rho_S(t) \otimes \rho_B. \quad (4.4)$$

Substituindo o estado do sistema total pelo estado separável na equação (4.3) ficamos com

$$\dot{\rho}_S(t) = - \int_0^t ds Tr_B[H_I(t), [H_I(s), \rho_S(s) \otimes \rho_B]]. \quad (4.5)$$

A aproximação Markoviana considera que as excitações no ambiente e a existência de suas coerências acontecem em tempos muito mais curtos do que as escalas de observação do sistema. A princípio, o estado do ambiente é alterado a depender do estado do sistema e posteriormente o estado do sistema também sofre influência dessa mudança que provocou no ambiente. Com isso, a dinâmica do sistema pode depender não só dos seu estado atual, mas também dos estados passados. Porém, quando a influência do sistema no ambiente decai mais rapidamente do que a escala em que conseguimos rastrear o estado de  $\rho_S$ , negligenciamos o impacto na equação dinâmica dos estados passados do sistema reduzido advindas da interação com o banho. Por isso, trocamos  $\rho_S(s)$  em (4.5) por  $\rho_S(t)$ .

$$\dot{\rho}_S(t) = - \int_0^t ds Tr_B[H_I(t), [H_I(s), \rho_S(t) \otimes \rho_B]] \quad (4.6)$$

Essa substituição poderia ser similarmente obtida usando (4.2) para encontrar  $\rho(s)$  em função de  $\rho(t)$  e excluindo os termos de terceira ordem no acoplamento entre o sistema e o ambiente. (39)

Essa é a equação de Redfield, uma equação local, que depende do operador densidade do sistema de interesse apenas no instante presente. Trocando  $s$  por  $t - s$  e levando o limite superior de integração para infinito, temos

$$\dot{\rho}_S(t) = - \int_0^\infty ds \text{Tr}_B[H_I(t), [H_I(t-s), \rho_S(t) \otimes \rho_B]]. \quad (4.7)$$

A mudança no limite de integração de  $t$  para infinito é possível desde que o integrando vá a zero rapidamente conforme  $s$  aumenta. Com mais algumas manipulações e a aproximação secular, veremos emergir uma equação mestra local na forma de Lindblad e para a qual os operadores não possuem dependência temporal.

Para verificar a dependência temporal na equação, primeiramente escrevemos o hamiltoniano de interação na versão de Schrödinger como  $H_I = \sum_\alpha A_\alpha \otimes B_\alpha$ . Na versão de interação, esse hamiltoniano adquire a forma  $H_I(t) = \sum_{\alpha,\omega} e^{-i\omega t} A_\alpha(\omega) \otimes B_\alpha(t)$  (20), onde  $A_\alpha(\omega) = \sum_{\epsilon' - \epsilon = \omega} \Pi(\epsilon) A_\alpha \Pi(\epsilon')$ . Os operadores  $\Pi(\epsilon)$  são projetores no espaço de autovetores de  $H_S$  com autovalores  $\epsilon$ , enquanto  $B_\alpha(t) = e^{iH_B t} B_\alpha e^{-iH_B t}$ . A equação mestra em função desses operadores na versão de interação fica

$$\dot{\rho}(t) = \sum_{\omega,\omega'} \sum_{\alpha,\beta} e^{-i(\omega' - \omega)t} \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left( A_\beta(\omega) \rho_S(t) A_\alpha^\dagger(\omega') - A_\alpha^\dagger(\omega') A_\beta(\omega) \rho_S(t) \right) + h.c. \quad (4.8)$$

onde  $h.c.$  indica hermitiano conjugado do termo explícito e

$$\Gamma_{\alpha\beta}(\omega) \equiv \int_0^\infty ds e^{i\omega s} \langle B_\alpha^\dagger(t) B_\beta(t-s) \rangle \quad (4.9)$$

Supondo que  $\rho_B$  é um estado estacionário  $[H_B, \rho_B] = 0$ , encontramos que as funções de correlação do banho são homogêneas no tempo

$$\langle B_\alpha^\dagger(t) B_\beta(t-s) \rangle = \langle B_\alpha^\dagger(s) B_\beta(0) \rangle \quad (4.10)$$

e, portanto, o resultado da integral  $\Gamma_{\alpha\beta}(\omega)$  é independente de  $t$ . Perceba que para isso foi importante levar o limite da integral de (4.7) para infinito, o que exigiu considerar que o integrando decai rapidamente. Nesse ponto, constatamos que o desaparecimento desse integrando depende das escalas em que as funções de correlação do ambiente decaem com o tempo. Essa escala  $\tau_B$  precisa ser muito pequena quando comparada à escala de tempo  $\tau_R$  em que o sistema varia apreciavelmente. Mas esse decaimento só será verdadeiramente satisfeito quando o ambiente for composto de um contínuo de frequências.

Notamos que ainda há dependência temporal dos operadores de (4.8) devido às exponenciais  $e^{-i(\omega' - \omega)t}$ . Contudo, essa dependência também pode ser negligenciada. O inverso das frequências do sistema implica na existência de uma escala de tempo  $\tau_S$  típica da evolução deste último. Se os termos com  $\omega' \neq \omega$  oscilam muito na escala de tempo  $\tau_R$  em que o sistema varia apreciavelmente, podemos negligenciá-los e manter apenas os termos com  $\omega' = \omega$  - adotamos a chamada aproximação secular. Resta, portanto, apenas

$$\dot{\rho}(t) = \sum_{\omega} \sum_{\alpha,\beta} \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left( A_\beta(\omega) \rho_S(t) A_\alpha^\dagger(\omega) - A_\alpha^\dagger(\omega) A_\beta(\omega) \rho_S(t) \right) + h.c. \quad (4.11)$$

Agora basta rearranjar os termos na forma de Lindblad

$$\dot{\rho}_S(t) = -i[H_{LS}, \rho_S(t)] + \mathcal{D}(\rho_S(t)) \quad (4.12)$$

com o hamiltoniano sendo

$$H_{LS} = \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} S_{\alpha\beta}(\omega) A_{\alpha}^{\dagger}(\omega) A_{\beta}(\omega) \quad (4.13)$$

e o dissipador

$$\mathcal{D}(\rho_S(t)) = \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha\beta}(\omega) \left( A_{\beta}(\omega) \rho_S A_{\alpha}(\omega)^{\dagger} - \frac{1}{2} \{ (A_{\alpha}(\omega))^{\dagger} A_{\beta}(\omega), \rho_S \} \right). \quad (4.14)$$

Para os quais utilizamos as definições

$$S_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{2i} (\Gamma_{\alpha\beta}(\omega) - \Gamma_{\beta\alpha}^*(\omega)) \quad (4.15)$$

e

$$\gamma_{\alpha\beta}(\omega) = \Gamma_{\alpha\beta}(\omega) + \Gamma_{\beta\alpha}^*(\omega) \quad (4.16)$$

que correspondem a entradas de matrizes hermitianas. A aproximação secular garante a positividade das taxas de decaimento decorrentes das aproximações de Born-Markov. (19) E, portanto, leva todos os operadores  $\rho_S(t_0)$  a outros operadores densidade. Outras aproximações que mantêm termos com frequências diferentes e garantem a positividade das taxas são estudadas em. (40)

## 4.2 Operadores de projeção

Alternativamente à derivação anterior, os métodos de operadores de projeção separam o sistema total em um termo relevante e um "irrelevante" e desenvolvem equações para cada um. Esses métodos permitem encontrar equações gerais e exatas, porém complicadas. As suposições mais comuns são estado inicial separável e acoplamento fraco, assim como feito nas aproximações de Born-Markov. Mas, diferente destas últimas, os métodos que falaremos aqui não supõe que o estado do universo é um estado produto a todo instante, como fizemos em (4.4) na aproximação de Born. Sendo assim, os métodos de operadores de projeção não excluem em suas considerações casos em que aparecem correlações significativas ao longo da dinâmica. E também podem ser apropriados para situações em que há refluxo de informação do ambiente para o sistema (não-markovianidade), diferentemente da equação mestra encontrada em (4.12) ao final do conjunto de aproximações de Born-Markov.

Para encontrar as equações dinâmicas do sistema de interesse, costumamos tomar o traço nos graus de liberdade do ambiente. Nessas técnicas de operadores de projeção, associamos essa operação do traço parcial a uma operação entre estados do sistema total, dada por um operador  $\mathcal{P}$  que tem características de um operador de projeção. A parte



relevante  $\mathcal{P}\rho(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_B$  é a projeção do estado do universo em  $t$  no estado atual do sistema de interesse combinado a um estado fixo do ambiente. Apesar de  $\mathcal{P}$  ser um operador que atua no espaço dos operadores densidade do sistema total, suas características focam apenas na dinâmica de  $\rho_S(t)$ . Por isso, chamamos  $\mathcal{P}$  de projetor na parte relevante do operador densidade, enquanto seu complementar é o operador na parte irrelevante. Tendo as equações para  $\mathcal{P}\rho(t)$ , obtemos as equações para o sistema reduzido.

#### 4.2.1 Nakajima-Zwanzig

Inicialmente, o método de Nakajima-Zwanzig foi uma proposta de usar operadores de projeção para resolver problemas de estatística de ensembles quânticos e clássicos. (41) O objetivo era descrever a equação cinética para a parte relevante de um ensemble (que, no nosso caso, é aquela que dá a dinâmica do sistema quântico reduzido) e essa equação é construída de uma forma geral, que poderia ser usada para uma teoria clássica (estatística) ou quântica. A forma exata da equação, encontrada nos trabalhos iniciais, é de difícil aplicação, já que é uma equação integro-diferencial. Ao invés dela, comumente se usam aproximações, especialmente de interação fraca, o que leva equações aproximadas, mas muito mais simples. Além disso, a demonstração feita em (41) supõe um gerador independente do tempo, mas é possível chegar a uma equação diferencial geral para o sistema de interesse sem tomar um gerador com características específicas.

O detalhamento da demonstração pode ser acompanhado em. (19,20) Assim como na revisão das aproximações de Born-Markov, nosso objetivo aqui é retomar passos importantes que evidenciem o domínio de validade desses métodos, as equações resultantes e a sua aplicabilidade.

Partimos da equação de Liouville para o universo. Escrevemos o hamiltoniano do sistema total como  $H = H_0 + \alpha H_I$ , onde a constante  $\alpha$  representa a força da interação entre o sistema e o ambiente, dada pelo hamiltoniano de interação  $\alpha H_I$ . Novamente usamos a versão de interação, na qual  $\alpha$  multiplica o gerador  $\mathcal{L}(t)$ :

$$\dot{\rho}(t) = -i\alpha[H_I(t), \rho(t)] \equiv \alpha\mathcal{L}(t)\rho(t). \quad (4.17)$$

Nesse ponto começaremos a fazer uso dos operadores de projeção. Definimos o operador  $\mathcal{P}$  da seguinte forma:

$$\mathcal{P}\rho \equiv Tr_B\{\rho\} \otimes \rho_B = \rho_S \otimes \rho_B. \quad (4.18)$$

Na definição acima,  $\rho_B$  é um estado fixo do ambiente. Como veremos mais pra frente, as equações são significativamente simplificadas quando tomamos um estado inicial separável e  $\rho_B = Tr_S\{\rho\}$ . Construindo dessa forma, o operador de projeção carrega todas as informações sobre o sistema de interesse  $\rho_S$ . Tanto as características locais quanto a própria dinâmica do sistema reduzido são facilmente obtidas da dinâmica de  $\mathcal{P}\rho(t)$  através do traço parcial no ambiente. Também definimos um segundo operador de projeção

complementar a  $\mathcal{P}$ ,

$$\mathcal{Q}\rho = \rho - \mathcal{P}\rho, \quad (4.19)$$

de forma que  $\mathcal{Q} + \mathcal{P} = 1$ . É possível verificar que esses operadores têm todas as propriedades de operadores de projeção. (20) Aplicando os operadores de projeção à equação de Liouville para o sistema total, obtemos

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho(t) = \alpha\mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{P}\rho(t) + \alpha\mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{Q}\rho(t) \quad (4.20)$$

e

$$\frac{d}{dt}\mathcal{Q}\rho(t) = \alpha\mathcal{Q}\mathcal{L}(t)\mathcal{P}\rho(t) + \alpha\mathcal{Q}\mathcal{L}(t)\mathcal{Q}\rho(t) \quad (4.21)$$

resolvendo as equações para  $\mathcal{P}\rho(t)$  e  $\mathcal{Q}\rho(t)$  e substituindo a última na primeira, encontra-se a equação para  $\mathcal{P}\rho(t)$ . A forma mais geral da equação de Nakajima-Zwanzig é

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho(t) = \int_{t_0}^t ds\mathcal{K}(t,s)\mathcal{P}\rho(s) + \alpha\mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{G}(t,t_0)\mathcal{Q}\rho(t_0) + \alpha\mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{P}\rho(t) \quad (4.22)$$

O operador  $\mathcal{K}(t,s) = \alpha^2\mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{G}(t,s)\mathcal{Q}\mathcal{L}(s)\mathcal{P}$  é chamado núcleo de memória (*convolution memory kernel*) e indica a dependencia do estado atual em estados passados do sistema, já que a integral tem contribuições de todos os  $\rho(s)$  desde  $s = t_0$ . E  $\mathcal{G}(t,s)$  é a solução da equação  $\frac{d}{dt}\mathcal{G}(t,s) = \alpha\mathcal{Q}\mathcal{L}(t)\mathcal{G}(t,s)$ , que no caso geral será dada por  $\mathcal{G}(t,s) \equiv T_{\leftarrow} \exp\left[\alpha \int_s^t ds' \mathcal{Q}\mathcal{L}(s')\right]$  onde  $T$  é o operador de ordenamento temporal. É comum assumir que  $Tr_B\{H_I(t_1)H_I(t_2)\dots H_I(t_{2n+1})\rho_B\} = 0$  que implica em  $\mathcal{P}\mathcal{L}(t_1)\mathcal{L}(t_2)\dots\mathcal{L}(t_{2n+1})\mathcal{P} = 0$ . Nesse ponto, é suficiente ter  $Tr_B\{H_I(t)\rho_B\} = 0$  para anular o último termo de (4.22). Com essa consideração, a equação adquire a forma

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho(t) = \int_{t_0}^t ds\mathcal{K}(t,s)\mathcal{P}\rho(s) + \alpha\mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{G}(t,t_0)\mathcal{Q}\rho(t_0). \quad (4.23)$$

A equação acima é exata e também aceita estados iniciais correlacionados. Porém, costuma ser uma equação de difícil solução e, por isso, se faz uso de aproximações que tomam os termos iniciais de expansões em  $\alpha$ . Para simplificar a equação, costuma-se assumir estado inicial separável e que  $\rho_B$  de (4.18) é exatamente  $Tr_S\{\rho(t_0)\} = \rho_B$ . Tendo, então,  $\rho(t_0) = \rho_S(t_0) \otimes \rho_B = \mathcal{P}\rho(t_0)$  e sabendo que a ação do operador de projeção  $\mathcal{Q}$  é dada por (4.19), o segundo termo da equação é anulado e temos

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}\rho(t) = \int_{t_0}^t ds\mathcal{K}(t,s)\mathcal{P}\rho(s). \quad (4.24)$$

Tomar o estado inicial como um estado produto é uma consideração extremamente comum, é aceito pelo que foi discutido anteriormente quando assumimos essa mesma condição nas aproximação de Born-Markov. A última equação não é geral, mas ainda é exata e as considerações feitas até aqui são válidas em muitos contextos. Além disso, na equação (4.24), ainda está presente a integral que representa efeitos de memória através dos diferentes instantes que o integrando percorre. Espera-se que as situações em que não há

efeitos de memória sejam dadas por  $K(t, s) \approx \delta(t - s)$ , o que implica que a dinâmica em  $t$  só dependerá do estado instantâneo do sistema.

Se tolerarmos uma solução aproximada de segunda ordem em  $\alpha$  (o que é uma boa aproximação para interação fraca), substituímos  $\mathfrak{L}(t)$  e olhamos apenas para a parte da equação que descreve o sistema de interesse. Chegamos a

$$\dot{\rho}_S(t) = -\alpha^2 \int_{t_0}^t ds \text{Tr}_B[H_I(t), [H_I(s), \rho_S(s) \otimes \rho_B]]. \quad (4.25)$$

Essa equação é análoga a (4.5), que encontramos durante a derivação microscópica, tendo assumido estado inicial separável,  $\text{Tr}_B[H_I(t), \rho(0)] = 0$  e que a interação é fraca o suficiente para não mudar apreciavelmente o estado do ambiente, de forma que  $\rho(t) \approx \rho_S(t) \otimes \rho_B$ . Aqui também assumimos estado inicial separável e a condição  $\text{Tr}_B\{H_I(t)\rho_B\} = 0$  implica em  $\text{Tr}_B[H_I(t), \rho(0)] = 0$  quando  $\rho(t_0) = \rho_S(t_0) \otimes \rho_B$ . Não precisamos assumir que o estado do ambiente não muda com a interação, o que é uma consideração bastante forte. Mas encontramos uma solução análoga considerando que a interação é fraca o suficiente para que o termo até segunda ordem em  $\alpha$  descreva bem a evolução. À vista disso, entendemos que sugerir que  $\rho_B$  é constante no tempo como consequência da interação, é tomar um procedimento que resulta em uma equação tão boa quanto uma aproximação de segunda ordem na constante de acoplamento. Mas de uma forma menos explícita.

#### 4.2.2 TCL

O método TCL (*time convolutionless*), é também uma técnica que faz uso dos operadores de projeção, mas com algumas concessões além de Nakajima-Zwanzig, de forma a eliminar a integral de convolução que aparece nas equações (4.22), (4.23) e (4.24). A eliminação da integral torna as equações para  $\rho_S(t)$  locais no tempo sem necessidade de supor  $\rho(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_B$  para todo instante, como feito na aproximação de Born. Essas equações em geral são dadas por geradores dependentes do tempo e possivelmente não-markovianas, abrangendo diversas situações que (4.12) encontrada após o conjunto de aproximações de Born-Markov não é capaz de prever.

Considere (4.22) e a solução mais geral de (4.21). Com o objetivo de tornar essas equações locais no tempo, faz-se uso do inverso do superoperador que dá a evolução temporal do universo. Esse operador será formalmente dado por  $G(t, s) = T_{\rightarrow} \exp \left[ -\alpha \int_s^t ds' \mathfrak{L}(s') \right]$  onde  $T_{\rightarrow}$  é o operador de ordenamento antitemporal. Esse operador permite reescrever  $\rho(s)$  como  $G(t, s)\rho(t)$ , eliminando os estados anteriores do sistema de interesse da integral e concentrando a dependencia em estados passados nos operadores. Definimos ainda o operador  $\Sigma(t) = \alpha \int_{t_0}^t ds \mathcal{G}(T, s) \mathcal{Q} \mathfrak{L}(s) \mathcal{P} G(t, s)$ . Supondo a existência de  $(1 - \Sigma(t))^{-1}$ , é possível escrever

$$\frac{d}{dt} \mathcal{P} \rho(t) = \mathcal{K}(t) \mathcal{P} \rho(t) + \mathcal{I}(t) \mathcal{Q} \rho(t_0), \quad (4.26)$$

onde  $\mathcal{K}(t) = \alpha \mathcal{P} \mathfrak{L}(t) [1 - \Sigma(t)]^{-1} \mathcal{P}$  e  $\mathcal{I}(t) = \alpha \mathcal{P} \mathfrak{L}(t) [1 - \Sigma(t)]^{-1} \mathcal{G}(t, t_0) \mathcal{Q}$ . Em geral, existe a inversa  $(1 - \Sigma(t))^{-1}$  quando o sistema está suficientemente próximo ao instante inicial  $t \approx t_0$  ou quando a interação é fraca. Por último, sempre que  $\rho(t_0) = \rho_S(t_0) \otimes \rho_B$ , o operador  $\mathcal{Q}\rho(t_0)$  zera o termo inomogêneo. Nesse caso, a equação só depende do instante  $t$  através do gerador TCL  $\mathcal{K}(t)$ .

$$\frac{d}{dt} \mathcal{P} \rho(t) = \mathcal{K}(t) \mathcal{P} \rho(t) \quad (4.27)$$

#### 4.2.2.1 Expansão em série perturbativa

Começamos supondo que  $\mathcal{K}(t)$  existe, ou seja, que a inversa anterior  $(1 - \Sigma(t))^{-1}$  existe, e ainda que ela pode ser expressa em ordens de  $\Sigma(t)$ . Expandimos  $\mathcal{K}(t)$  em ordens de  $\alpha$ :  $\mathcal{K}(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha^n \mathcal{K}_n(t)$ . Considerando também a dependência de  $(1 - \Sigma(t))^{-1}$  nas diferentes ordens de  $\alpha$ , encontramos cada um dos  $\mathcal{K}_n(t)$ . Assumindo que vale

$$Tr_B \{ H_I(t_1) H_I(t_2) \dots H_I(t_{2n+1}) \rho_B \} = 0, \quad (4.28)$$

simplificamos diversos termos da expansão. Para uma contribuição até segunda ordem em  $\alpha$ , é suficiente considerar  $Tr_B \{ H_I(t) \rho_B \} = 0$  como em NZ. Essa condição resulta em  $\mathcal{K}_1(t) = 0$  e

$$\mathcal{K}_2(t) = \int_0^t dt_1 \mathcal{P} \mathfrak{L}(t) \mathfrak{L}(t_1) \mathcal{P}. \quad (4.29)$$

Usando esse resultado em (4.27), substituindo  $\mathfrak{L}(t)$  pelo comutador e tomando o traço parcial nos graus de liberdade do ambiente, encontramos

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -\alpha^2 \int_0^t ds Tr_B [H_I(t), [H_I(s), \rho_S(t) \otimes \rho_B]]. \quad (4.30)$$

Recuperamos exatamente (4.6) sem assumir  $\rho_B$  constante, mas com um domínio de validade restrito devido à necessidade de existir a inversa  $(1 - \Sigma(t))^{-1}$ . Vemos que a aproximação markoviana é equivalente a uma aproximação de segunda ordem da equação diferencial local no tempo, válida quando o acoplamento é fraco ou o tempo que se passou foi muito pequeno. Observamos que essa equação diferente da equação de Nakajima-Zwanzig pela dependência temporal de  $\rho_S(t)$ . Contudo, o erro ao trocar  $\rho_S(s)$  por  $\rho_S(t)$  só adiciona mais ordens em  $\alpha$  e não deve aparecer em uma aproximação de segunda ordem para tempos suficientemente curtos.

### 4.3 Um exemplo de aplicação

Vamos examinar os efeitos das aproximações de Born-Markov e de segunda ordem nas equações dos métodos NZ e TCL. Para tal finalidade, lidamos com um sistema de dois níveis em contato com um ambiente composto por um conjunto de modos de oscilação de frequências  $\omega_k$ , que pode ser tomado como contínuo. O conjunto sistema de dois níveis

mais osciladores tem uma dinâmica governada pelo hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2}\sigma_Z\omega_0 + \sum_K b_k^\dagger b_k \omega_k + \sum_k \sigma_Z(g_k b_k^\dagger + g_k^* b_k), \quad (4.31)$$

onde o último somatório é o termo do hamiltoniano que representa a interação entre os dois subsistemas e os dois primeiros termos representam, respectivamente, o hamiltoniano do sistema de dois níveis e do conjunto de osciladores quando isolados.

Porque o hamiltoniano nu do sistema de dois níveis comuta com o hamiltoniano de interação, as populações do operador densidade do sistema de dois níveis  $\rho_S(t)$  não são alteradas. Tomando um estado inicial separável e o banho em um estado de equilíbrio a uma temperatura  $T$ ,  $\rho_B = \exp(-\sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k/T)/Z$ , a solução exata é conhecida (42) e corresponde ao modelo chamado *dephasing model*. Como a diagonal é mantida constante, podemos observar apenas  $\rho_{S10}(t) = \langle 1|Tr_B\{U(t)\rho_T(0)U^\dagger(t)\}|0\rangle$ . Na versão de interação, a solução para  $\rho_{S10}(t)$  quando o estado inicial é dado por  $\rho_T(0) = \rho_S(0) \otimes \exp(-\sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k/T)/Z$  é

$$\rho_{S10}(t) = \rho_{S10}(0) \exp\left(\sum_k -\frac{1}{2}|\xi_k(t)|^2 \coth\left(\frac{\omega_k}{2T}\right)\right), \quad (4.32)$$

onde  $\xi_k(t) = -2i \int_0^t g_k e^{i\omega_k s} ds$ . E podemos trocar o somatório por um integral no limite de contínuos modos. A equação diferencial exata para  $\rho_{S10}(t)$  torna-se

$$\dot{\rho}_{S10}(t) = -\rho_{S10}(t) \sum_k 4|g_k|^2 \frac{\sin(\omega_k t)}{\omega_k} \coth\left(\frac{\omega_k}{2T}\right) \quad (4.33)$$

Para comparar esse resultado exato com as aproximações de Born-Markov e as equações resultantes de aproximações nos métodos de operadores projeção, devemos calcular

$$\dot{\rho}_S(t) = -\alpha^2 \int_0^t ds Tr_B[H_I(t), [H_I(s), \rho_T]] \quad (4.34)$$

onde  $\rho_T$  é algum estado do sistema total, que pode ser tomado separável e calculado em diferentes instantes de tempo. Para encontrar o resultado da aproximação (4.25) usamos  $\rho_T = \rho_S(s) \otimes \rho_B$ ; para (4.30), tomamos  $\rho_T = \rho_S(t) \otimes \rho_B$ . Esses cálculos devem resultar, respectivamente, nas dinâmicas obtidas apenas com a aproximação de Born e com aproximação de Born-Markov no segundo caso. Como já salientamos, essas aproximações também são equivalentes às aproximações de segunda ordem na constante de acoplamento nos formalismos de Nakajima-Zwanzig e TCL, respectivamente.

No cenário em que o estado inicial é separável e o banho em equilíbrio térmico, a condição  $Tr_B\{H_I(t)\rho_B\} = 0$  (que implica também em  $Tr_B[H_I(t), \rho(0)] = 0$ ) é satisfeita. Relembrando (4.3), veremos que essa condição significa que (4.34) deve recuperar o resultado exato quando  $\rho_T$  for substituído pelo estado  $\rho_T(s)$  do sistema total no instante  $s$ , que pode possuir correlações. Também permite que usemos (4.25) e (4.30) como um aproximações de segunda ordem quando a interação é fraca.

O cálculo de (4.34) considerando  $\rho_T = \rho_S(t') \otimes \rho_B$  onde o estado do banho é  $\rho_B = \exp(-\sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k / T) / Z$  para alguma temperatura  $T$  resulta em:

$$\dot{\rho}_{S10}(t) = -4 \sum_k |g_k|^2 \left( \int_0^t \cos(\omega_k(t-s)) \rho_{S10}(t') ds \right) \coth\left(\frac{\omega_k}{2T}\right). \quad (4.35)$$

Que se iguala ao resultado exato (4.33) quando escolhermos  $\rho_{S10}(t') = \rho_{S10}(t)$ . Ou seja, quando tomamos a aproximação de Born em conjunto com a aproximação de Markov, essa interação com um estado inicial separável e ainda banho em equilíbrio térmico recuperam o resultado exato.

Esse já é um resultado conhecido para qualquer sistema cujo hamiltoniano  $H_S$  comuta com o hamiltoniano de interação  $H_I$ , com estado inicial separável e banho em equilíbrio térmico. (43) E acontece porque todos os demais termos da expansão zeram para um estado  $\rho_B$  com características gaussianas para cada frequência  $k$ . Para um outro estado com características diferentes, os demais termos da expansão em ordens da constante de acoplamento não serão nulos em geral e as equações até segunda ordem serão apenas aproximações.

Como  $\rho_S(s) \neq \rho_S(t)$ , fica claro que a aproximação de Born (ou a aproximação até segunda ordem da equação de Nakajima) é apenas aproximada e não exata como a de Born-Markov (ou aproximação até segunda ordem de TCL). Porém, isso não precisa ser verdade sempre. Dentre esses dois conjuntos de aproximações, o que melhor recupera os resultados exatos dependerá do sistema e da interação em questão.

No limite onde as possíveis frequências são contínuas, podemos reescrever a solução (4.33) como

$$\dot{\rho}_{S10}(t) = -\rho_{S10}(t) \int d\omega \mathcal{J}(\omega) \frac{\sin(\omega t)}{\omega} \coth\left(\frac{\omega}{2T}\right) \quad (4.36)$$

onde  $\mathcal{J}(\omega)$  é uma função que codifica a densidade de modos de frequência  $\omega$  e a intensidade da interação entre o sistema e esses modos. Analogamente, as soluções aproximadas no limite de contínuas frequências são dadas por

$$\dot{\rho}_{S10}(t) = - \int d\omega \mathcal{J}(\omega) \left( \int_0^t ds \cos(\omega(t-s)) \rho_{S10}(t') \right) \coth\left(\frac{\omega}{2T}\right). \quad (4.37)$$

onde novamente devemos substituir  $\rho_{S10}(t')$  por  $\rho_{S10}(s)$  para que a equação corresponda à aproximação de Born sozinha, ou por  $\rho_{S10}(t)$  para obter a aproximação de Born-Markov.

#### 4.3.1 Correlações clássicas

Com a intenção de clarificar como as aproximações começam a falhar, vamos considerar um estado inicial um pouco mais geral: um estado com correlações clássicas. Para isso, tomamos

$$\rho_T(0) = a \rho_S^+(0) \otimes \rho_B(T_1) + (1-a) \rho_S^-(0) \otimes \rho_B(T_2) \quad (4.38)$$

onde  $0 \leq a \leq 1$  e  $\rho_B(T_i)$  é um estado de equilíbrio do ambiente de osciladores a uma temperatura  $T_i$ . Sabendo que o estado do sistema de interesse é dado pelo traço no universo, usamos a linearidade do traço e do operador de evolução temporal do sistema total  $U(t)$ :

$$\begin{aligned} \rho_{S10}(t) &= \langle 1 | Tr_B \{ U(t) \rho_T(0) U^\dagger(t) \} | 0 \rangle = \\ &a \langle 1 | Tr_B \{ U(t) \rho_S^+(0) \otimes \rho_B(T_1) U^\dagger(t) \} | 0 \rangle + (1-a) \langle 1 | Tr_B \{ U(t) \rho_S^-(0) \otimes \rho_B(T_2) U^\dagger(t) \} | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Escrita dessa forma, a igualdade acima facilita a identificação da solução exata para o estado inicial escolhido. Conhecemos o resultado exato de cada  $\langle 1 | Tr_B \{ U(t) \rho_S^i(0) \otimes \rho_B(T_j) U^\dagger(t) \} | 0 \rangle$  porque satisfazem as condições necessárias para encontrar a solução exata (4.32). Assim, substituímos essa solução para cada um dos termos e encontramos

$$\begin{aligned} \rho_{S10}(t) &= a \rho_{S10}^+(0) \exp \left( \sum_k -\frac{1}{2} |\xi_k(t)|^2 \coth \left( \frac{\omega_k}{2T_1} \right) \right) + \\ &(1-a) \rho_{S10}^-(0) \exp \left( \sum_k -\frac{1}{2} |\xi_k(t)|^2 \coth \left( \frac{\omega_k}{2T_2} \right) \right) \end{aligned} \quad (4.40)$$

A partir da qual podemos calcular a derivada exata

$$\dot{\rho}_{S10}(t) = -4 \sum_k \frac{\sin(\omega_k t)}{\omega_k} \left( a \rho_{S10}^+(t) \coth \left( \frac{\omega_k}{2T_1} \right) + (1-a) \rho_{S10}^-(t) \coth \left( \frac{\omega_k}{2T_2} \right) \right) \quad (4.41)$$

onde

$$\rho_{S10}^+(t) = \rho_{S10}^+(0) \exp \left( \sum_k -\frac{1}{2} |\xi_k(t)|^2 \coth \left( \frac{\omega_k}{2T_1} \right) \right) \quad (4.42)$$

e

$$\rho_{S10}^-(t) = \rho_{S10}^-(0) \exp \left( \sum_k -\frac{1}{2} |\xi_k(t)|^2 \coth \left( \frac{\omega_k}{2T_2} \right) \right) \quad (4.43)$$

A fim de calcular a solução aproximada de Born-Markov, tomamos o estado separável  $\rho_T(t) = \rho_S(t) \otimes Tr_S \{ \rho_T(0) \}$  e substituímos em (4.35). A derivada decorrente é

$$\dot{\rho}_{S10}(t) = -4 \rho_{S10}(t) \sum_k \frac{\sin(\omega_k t)}{\omega_k} \left( a \coth \left( \frac{\omega_k}{2T_1} \right) + (1-a) \coth \left( \frac{\omega_k}{2T_2} \right) \right), \quad (4.44)$$

que se diferencia da solução exata. Apontando que a aproximação de Born-Markov só recupera o resultado exato para esse sistema quando o estado inicial não possui correlações.

### 4.3.2 Funções de correlação do ambiente

Para esse caso, o hamiltoniano de interação só possui um termo do tipo  $A_\alpha \otimes B_\beta$  e, portanto, só aparecem operadores de mesmo índice nas funções de correlação do banho. Considerando um estado separável e o banho em equilíbrio térmico, encontramos

$$\langle B_\alpha^\dagger(t') B_\alpha(t) \rangle = \sum_k |g_k|^2 \left( e^{i\omega_k(t'-t)} N(\omega_k) + e^{-i\omega_k(t'-t)} (N(\omega_k) + 1) \right) \quad (4.45)$$

com  $N(\omega_k) = 1/(e^{\omega_k/T} - 1)$ , de onde se verifica a homogeneidade das funções de correlação do ambiente

$$\langle B_\alpha^\dagger(t)B_\alpha(t-s) \rangle = \langle B_\alpha^\dagger(s)B_\alpha(0) \rangle, \quad (4.46)$$

como era esperado, já que  $[H_B, \rho_B] = 0$ . Para modos contínuos:

$$\langle B_\alpha^\dagger(t')B_\alpha(t) \rangle = \int d\omega \mathcal{J}(\omega) \left( e^{i\omega(t'-t)}N(\omega) + e^{-i\omega(t'-t)}(N(\omega) + 1) \right) \quad (4.47)$$

Chamamos por  $\mathcal{C}(t)$  a função de correlação  $\langle B_\alpha^\dagger(t)B_\alpha(t-s) \rangle$  e usamos uma função densidade espectral ôhmica  $\mathcal{J}(\omega) = \eta\omega e^{-\omega/\omega_c} = \sum_k |g_k|^2 \delta(\omega - \omega_k)$ . O gráfico da Figura 1 mostra a diferença no decaimento da função de correlação do banho para diferentes quantidades de frequências consideradas. Observamos que inicialmente, com poucas frequências, a consideração de um decaimento rápido que justifica tomar o limite superior da integral (4.7) como infinito é insustentável. Os tempos de recorrência da função de correlação  $\mathcal{C}(t)$  vão aumentando conforme o espaçamento entre as frequências consideradas diminui. Verifica-se que a recorrência acontece em  $t\omega_c = 2\pi/\Delta\omega$  onde  $\Delta\omega = 5/N_f$  é o espaçamento entre as diferentes frequências e  $N_f$  é a quantidade de frequências envolvidas. Para 300 frequências, por exemplo, o tempo de recorrência está além do intervalo observado. Deste modo, um decaimento sem recorrência só pode acontecer se o espaçamento tende a zero.

No gráfico da figura 2 apresentamos o perfil de decaimento da função de correlação para um ambiente composto de contínuos modos caracterizados pela densidade espectral ôhmica escolhida. Verifica-se que o gráfico 1 já apresentou um comportamento similar para o intervalo de tempo observado quando considerou-se 300 frequências. Devido à equação (4.47), a intensidade da interação que pode ser modificada por  $\eta$  só altera a amplitude de  $\mathcal{C}(t)$ , mas não o seu perfil de decaimento com o tempo.

No gráfico 3 observamos como o decaimento das coerências no tempo muda de acordo com a intensidade da interação. Diferentemente do que acontece para as funções de correlação, verificamos que o decaimento é mais rápido quanto maior o valor de  $\eta$ . Para  $\eta = 1$ , por exemplo, a escala de tempo em que o sistema decai é da mesma ordem da escala apresentada na figura 2 da função de correlação do banho. Por isso, mesmo quando o ambiente possui contínuos modos de oscilação, as diferenças entre escalas de tempo que são tomadas como hipóteses para a aproximação markoviana e a mudança nos limites da integral não são satisfeitas se o acoplamento entre o sistema e o ambiente é forte o suficiente. Especificamente para o caso estudado, o estado inicial do banho compensa a falha das justificativas para as aproximações de Born-Markov e permite uma solução exata através dessas aproximações mesmo para interações fortes, desde que chegue a haver mudança no limite da integral.



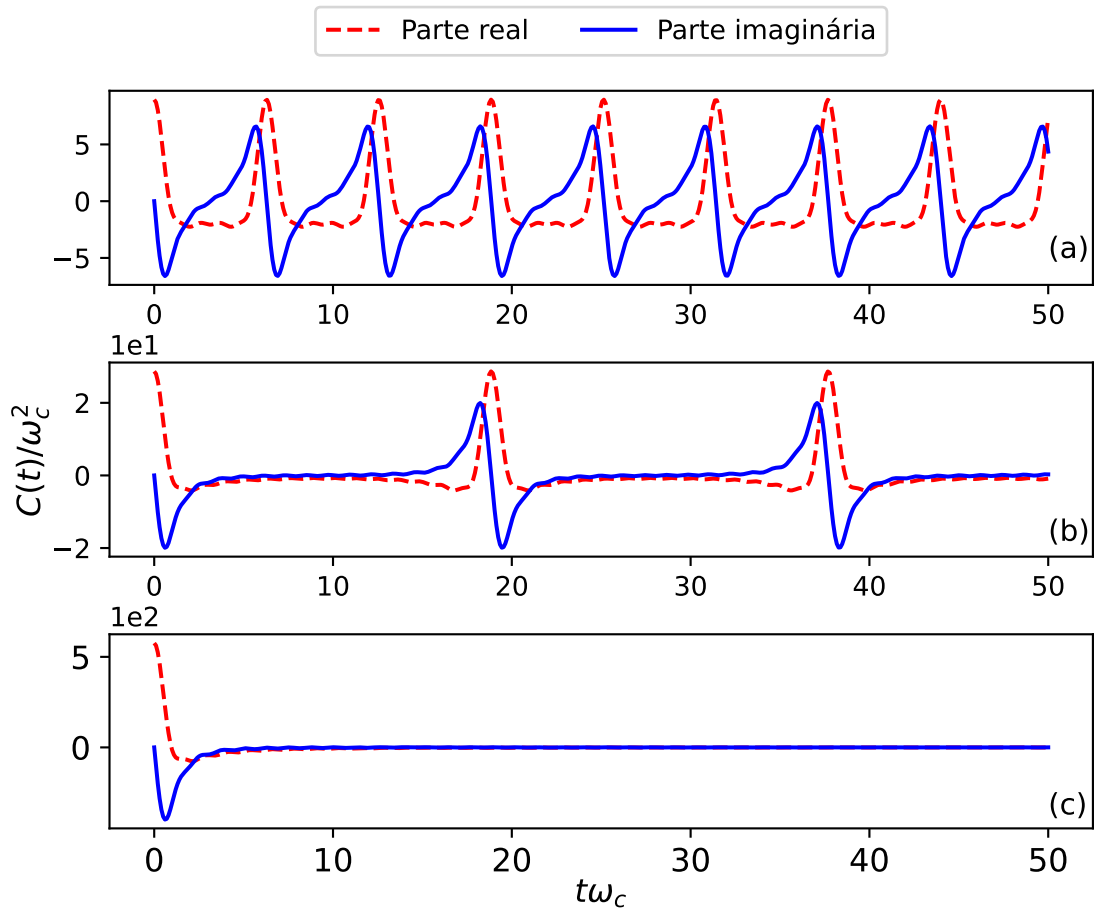


Figura 1 – Parte real e imaginária da função de correlação do banho em função do tempo para três conjuntos de frequências. Utilizou-se (a) cinco, (b) quinze e (c) trinta frequências igualmente espaçadas entre 0 e  $5 \omega/\omega_c$ . Observa-se que os tempos de recorrência aumentam conforme o espaçamento entre as frequências diminui. Para 300 frequências o tempo de recorrência está além do intervalo observado. Parâmetros utilizados em todos os gráficos:  $\eta = 10$  e  $T = 10^{-2}\omega_c$ . **Fonte:** Elaborada pela autora.

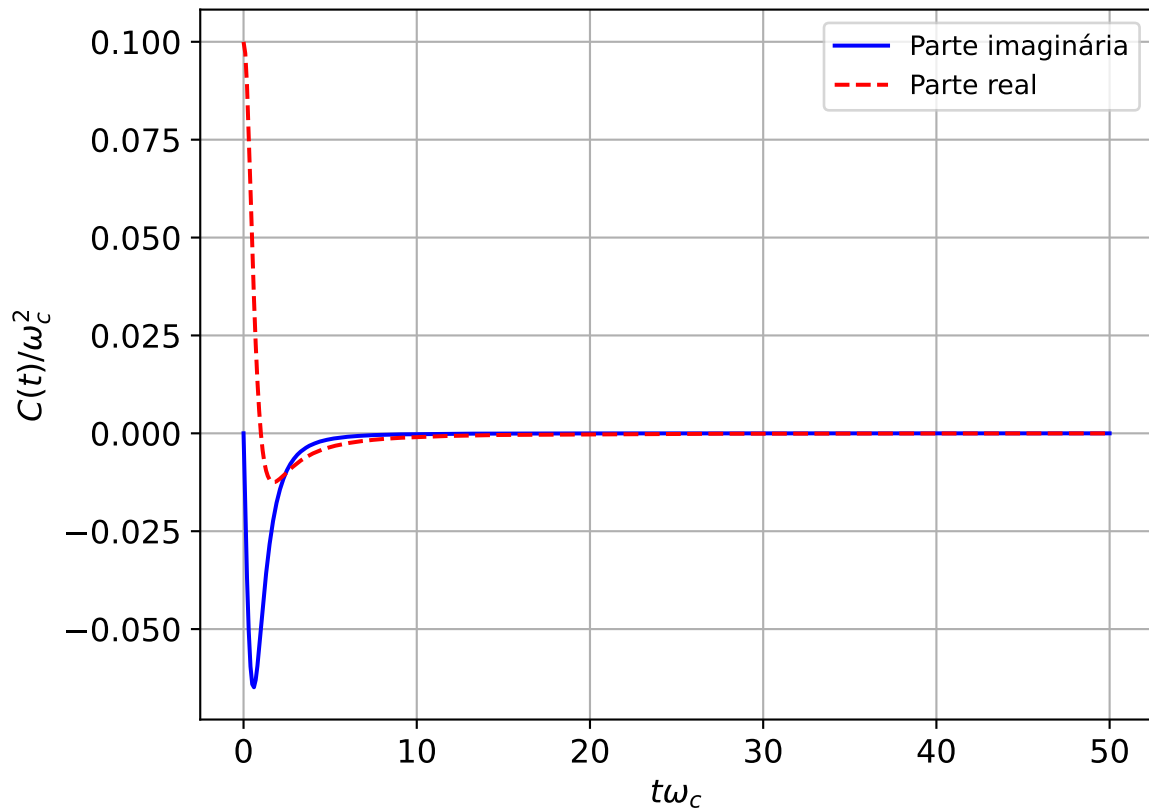


Figura 2 – Função de correlação do banho para contínuos modos e uma densidade espectral ôhmica  $\mathcal{J}(\omega) = \eta\omega e^{-\omega/\omega_c}$ . Utilizou-se os parâmetros  $\eta = 0.1$  e  $T = 10^{-2}\omega_c$  e a integral nas frequências foi calculada com os limites 0 e  $10\omega/\omega_c$ . Observa-se o decaimento inicial da função de correlação e um perfil semelhante ao que já era resultante na figura 1 quando utilizou-se 300 frequências.

**Fonte:** Elaborada pela autora.

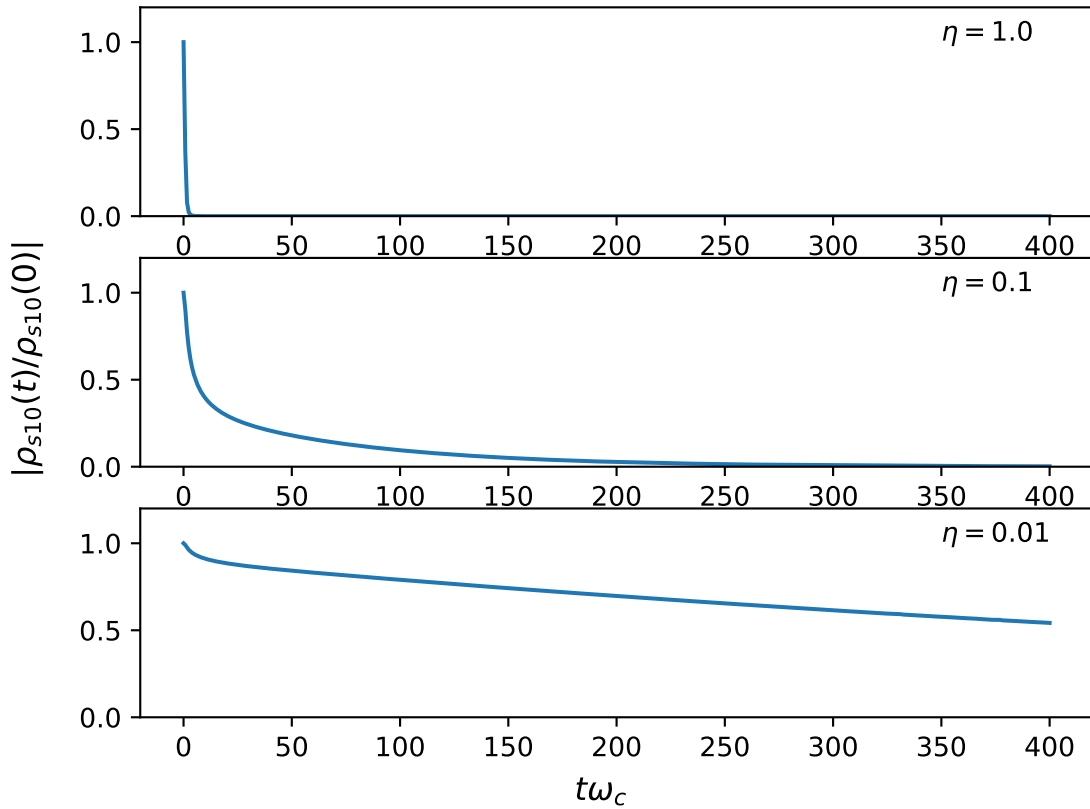


Figura 3 – Diferença no decaimento da coerência do sistema de dois níveis para três ordens diferentes de intensidade da interação com o ambiente para uma densidade espectral ôhmica  $\mathcal{J}(\omega) = \eta\omega e^{-\omega/\omega_c}$ . Observa-se que o decaimento é mais rápido para valores maiores de  $\eta$ . Para  $\eta = 1.0$ , por exemplo, a escala é da mesma ordem daquela da função de correlação do banho apresentada na figura 2, tornando improcedente assumir que estas últimas decaem muito mais rápido do que a escala de evolução do sistema mesmo para um banho que possui contínuas frequências. Essa diferença nas escalas de tempo é essencial para a argumentação que justifica as aproximações de Born-Markov e a mudança no limite da integral (4.7). Para todos os cálculos utilizou-se  $T = 10^{-2}\omega_c$ .

**Fonte:** Elaborada pela autora.



## 5 SUPEROPERADORES NA FORMA DE LINDBLAD SEM APROXIMAÇÕES

Estudamos no capítulo anterior as aproximações comumente utilizadas para justificar o uso de equações mestras na forma de Lindblad para sistemas quânticos abertos. Vimos que elas são bastante restritivas, em especial em relação ao estado inicial e à intensidade da interação entre o sistema e o ambiente. Logo, a extensão de resultados e medidas que fazem uso da forma de Lindblad para qualquer sistema quântico requer métodos mais gerais.

Neste capítulo, examinamos dois trabalhos publicados nos últimos anos que sugerem caminhos para associar operadores HPTA na forma de Lindblad para dinâmicas de sistemas reduzidos que não fazem suposições a respeito da intensidade do acoplamento com o ambiente e admitem correlações no estado inicial.

### 5.1 Método geral

No final de 2020, S. Alipour *et al.* provaram que equações mestras do tipo Lindblad são completamente gerais e conseguem descrever inclusive situações em que existem correlações entre o sistema de interesse e o ambiente desde o instante inicial. (11) Para entender a ideia dessa demonstração, vamos lembrar de (3.4), onde provamos que é sempre possível construir um mapa linear, que preserva traço e hermiticidade para o sistema reduzido se partirmos de um instante em que o estado do universo é um estado produto. Também vimos na seção 3.4.3 que, se temos mapas desse tipo (lineares e HPTP) e divisíveis, conseguimos conectar quaisquer dois instantes de uma dinâmica com mapas lineares HPTP e podemos obter uma equação mestra do tipo Lindblad para o sistema de interesse. Além disso, supor que as correlações são nulas no instante inicial e que a interação não provoca o aparecimento de fortes correlações ao longo da dinâmica foram aproximações feitas em diferentes métodos para permitir chegar a uma equação linear e local no tempo para  $\rho_S(t)$  no capítulo 4. Essas situações anteriores mostram que manter o estado global em um estado produto facilita enormemente o caminho para chegar a equações mestras do tipo Lindblad. Afinal, o traço nos graus de liberdade do ambiente resultará em operadores que atuam linearmente em  $\rho_S(t)$  quando o sistema total está em um estado separável. E para partir disso e chegar em uma equação de Lindblad, basta que esses operadores resultantes preservem hermiticidade e aniquilem traço.

Para escrever uma equação linear e local não só partindo de estados separáveis, mas de qualquer tipo de estado inicial, a ideia do artigo é fazer uma transformação que escreva

o termo de correlação do estado total como uma função do termo separável. Chamamos essa transformação de transformação de correlação. Tendo escrito o operador de correlação em função do estado separável, a equação diferencial resultante é uma equação para  $\rho_S(t) \otimes \rho_B(t)$  apenas. Como o interesse é na dinâmica de  $\rho_S(t)$ , basta tomar o traço da equação para o sistema total na versão de correlação para obter a equação desejada.

Já sabemos que nem toda combinação de estado separável e correlações é física e que a dinâmica do sistema reduzido possui influência dos valores das correlações. Como a transformação de correlação resulta em uma equação dinâmica exata, as contribuições do operador de correlação para dinâmica de  $\rho_S(t)$  necessariamente estarão presentes. Isso se dará através dos novos operadores que surgem para a equação diferencial de  $\rho_S(t) \otimes \rho_B(t)$  após a transformação, que não serão compatíveis com qualquer  $\rho_S(t_0)$  ainda que se mantenha o mesmo  $\rho_B(t_0)$ .

Nesta seção, explicamos a transformação de correlação proposta em (11). Demonstramos que esse método é geral, damos um exemplo de como utilizá-lo e comentamos suas vantagens e desvantagens.

### 5.1.1 A transformação de correlação

Como já vimos na equação (2.30), um estado qualquer de um sistema quântico bipartido pode ser escrito na forma  $\rho_{SB}(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_B(t) + \chi(t)$ . Onde  $\rho_S(t) = Tr_B\{\rho_{SB}(t)\}$  e  $\rho_B(t) = Tr_S\{\rho_{SB}(t)\}$ . *Correlating transformation* é o nome dado à transformação  $\mathcal{E}_\chi$  que leva o estado descorrelacionado ao estado correlacionado com correlação  $\chi$ :

$$\mathcal{E}_\chi[\rho_S(t) \otimes \rho_B(t)] = \rho_{SB}(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_B(t) + \chi(t) \quad (5.1)$$

Mostraremos a seguir que essa transformação é sempre possível.

O primeiro passo para construir versão de correlação é mostrar que todo operador de correlação  $\chi(t)$  pode ser escrito em função do estado separável  $\rho_S(t) \otimes \rho_B(t)$  com o qual  $\chi(t)$  resulta no estado do sistema total. A transformação proposta faz uso de um operador  $H_\chi(t)$  que chamaremos de *correlation parent operator* através da seguinte relação:

$$\chi(t) = -i[[H_\chi(t), \rho_S(t) \otimes \rho_B(t)]] \quad (5.2)$$

onde  $[[A, B]] = AB - B^\dagger A^\dagger$  é um comutador generalizado. Sabemos que  $\chi(t)$  é um operador hermitiano, e (5.2) garante essa propriedade mesmo que a solução para  $H_\chi$  não seja hermitiana.

Podemos reescrever (5.2) como

$$(\rho_S^\dagger(t) \otimes \rho_B^\dagger(t)) [iH_\chi^\dagger(t)] + [iH_\chi^\dagger(t)]^\dagger \rho_S(t) \otimes \rho_B(t) = \chi(t), \quad (5.3)$$

que é uma equação do tipo  $A^\dagger X + X^\dagger A = B$  onde  $B = \chi(t)$ ,  $A = \rho_S(t) \otimes \rho_B(t)$  e  $X = iH_\chi^\dagger(t)$ .

Em (44) é possível encontrar a solução mais geral para equações como  $A^\dagger X + X^\dagger A = B$  onde  $A$  e  $X$  podem ser operadores lineares entre espaços de Hilbert diferentes e é demonstrado que a solução para equações desse tipo não é única. Aqui vamos nos concentrar em verificar a existência de uma solução para  $H_\chi$  (tomamos a mais simples, em que os termos não únicos são tomados como nulos). Como  $\rho_S(t) \otimes \rho_B(t)$  em geral não é inversível, a solução mais simples para  $H_\chi$  será dada por

$$-iH_\chi(t) = \frac{1}{2}(I + P_0(t))\chi(t) (\rho_S^{-1}(t) \otimes \rho_B^{-1}(t)) \quad (5.4)$$

onde  $\rho_j^{-1}(t)$  representa o pseudo-inverso de  $\rho_j(t)$  e  $P_0 = I - (\rho_S^{-1} \otimes \rho_B^{-1})(\rho_S \otimes \rho_B) = I - (\rho_S \otimes \rho_B)(\rho_S^{-1} \otimes \rho_B^{-1})$ . Pseudo-inversas são generalizações de inversas que obedecem às seguintes relações (44, 45):

$$AA^{-1}A = A, \quad A^{-1}AA^{-1} = A^{-1}, \quad (AA^{-1})^\dagger = AA^{-1}, \quad (A^{-1}A)^\dagger = (A^{-1}A) \quad (5.5)$$

Para que (5.4) seja válida, a inversa  $\rho_S^{-1}(t) \otimes \rho_B^{-1}(t)$  precisa existir. Vamos lembrar que  $\rho_S(t) \otimes \rho_B(t)$  é um operador hermitiano e, portanto, admite uma representação diagonal com valores reais.

Considere a representação diagonal de um operador hermitiano  $A$ :

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_2 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & & & a_n \end{bmatrix}$$

A pseudo-inversa de  $A$ ,  $A^{-1}$  será dada por (45)

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} b_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & b_2 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & & & b_n \end{bmatrix}, \quad b_i = \begin{cases} a_i^{-1}, & a_i \neq 0 \\ 0, & a_i = 0 \end{cases}$$

É possível mostrar que  $A^{-1}$  construída como acima satisfaz todas as propriedades (5.5). Portanto, a inversa  $\rho_S^{-1}(t) \otimes \rho_B^{-1}(t)$  sempre existe e é facilmente encontrada desde que se conheça a decomposição espectral de  $\rho_S(t) \otimes \rho_B(t)$ .

Sabendo que sempre existe a inversa que dá a solução (5.4), podemos substituí-la na equação para  $\chi(t)$  e usar as propriedades de inversas para verificar que a solução proposta é válida. Para simplificar a notação, vamos usar  $\rho_S \otimes \rho_B \equiv \rho'_{SB}$  e ocultar a dependência temporal. Substituindo (5.4) em (5.3) e usando que  $\rho'_{SB} = (\rho'_{SB})^\dagger$ ,  $P_0 = P_0^\dagger$  e  $\chi = \chi^\dagger$ , obtemos

$$\rho'_{SB}(\rho'_{SB})^{-1}\chi\frac{1}{2}(I + P_0) + \frac{1}{2}(I + P_0)\chi(\rho'_{SB})^{-1}\rho'_{SB} = \chi \quad (5.6)$$

Substituindo  $(\rho'_{SB})^{-1}\rho'_{SB} = \rho'_{SB}(\rho'_{SB})^{-1} = I - P_0$ , temos

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{1}{2}(I - P_0)\chi(I + P_0) + \frac{1}{2}(I + P_0)\chi(I - P_0) = \\ &= \frac{1}{2}(\chi + \chi P_0 - P_0\chi - P_0\chi P_0 + \chi - \chi P_0 + P_0\chi - P_0\chi P_0) = \chi - P_0\chi P_0 \end{aligned} \quad (5.7)$$

Então (5.4) é a solução para  $H_\chi$  desde que  $P_0\chi P_0 = 0$ . Essa exigência aparece em todas as soluções demonstradas em (44) que não assumem  $A$  inversível. A condição  $P_0BP_0 = 0$ , onde  $P_0 = I - A^{-1}A$  é o projetor no espaço nulo de  $A$ , é necessária para existir uma solução para  $X$  que satisfaz  $A^\dagger X + X^\dagger A = B$ . Mostraremos que  $P_0\chi P_0 = 0$  é sempre satisfeito para  $\chi = \rho_{SB} - Tr_B\{\rho_{SB}\} \otimes Tr_S\{\rho_{SB}\}$ . E assim todas as condições necessárias para a existência de  $H_\chi$  que satisfaz (5.3) são sempre satisfeitas para os operadores densidade  $\rho_S \otimes \rho_B$  e o operador correlação  $\chi$  correspondente.

Escrevendo  $P_0$  em função de  $\rho'_{SB}$  e usando as propriedades dos operadores pseudo-inversos é fácil mostrar que  $\rho'_{SB}P_0 = 0$  (e portanto  $P_0\rho'_{SB}P_0 = 0$ ). Agora, vamos calcular  $P_0\rho_{SB}P_0$ , onde  $\rho_{SB} = \rho_S \otimes \rho_B + \chi$ . Usando a decomposição espectral de  $\rho_{SB} = \sum_i \xi_i |\xi_i\rangle \langle \xi_i|$  e que cada  $|\xi_i\rangle$  tem uma decomposição de Schmidt (1):  $|\xi_i\rangle = \sum_j \sqrt{\lambda_{i,j}} |e_{ij}^S\rangle |f_{ij}^B\rangle$ , escrevemos

$$\rho_{SB} = \sum_{ijk} \xi_i \sqrt{\lambda_{ij}\lambda_{ik}} |e_{ij}^S\rangle |f_{ij}^B\rangle \langle e_{ik}^S| \langle f_{ik}^B|. \quad (5.8)$$

Tomando o traço nos graus de liberdade do ambiente e do sistema obtemos cada um dos operadores

$$\rho_S = \sum_{ij} \xi_i \lambda_{ij} |e_{ij}^S\rangle \langle e_{ij}^S|, \quad \rho_B = \sum_{lk} \xi_l \lambda_{lk} |f_{lk}^B\rangle \langle f_{lk}^B|. \quad (5.9)$$

Será útil calcular explicitamente  $Tr[P_0\rho'_{SB}] = Tr[P_0\rho_S \otimes \rho_B]$ , que já sabemos ser nulo, para encontrar  $P_0\rho_{SB}P_0$ . Para cada termo  $i$  ou  $l$  dos somatórios de (5.9), os vetores  $|e_{ij}^S\rangle$  e  $|f_{lk}^B\rangle$  são parte de conjuntos  $\{|e_{ij}^S\rangle\}_{j=1}^{d_S^2}$  e  $\{|f_{lk}^B\rangle\}_{k=1}^{d_B^2}$  de vetores ortonormais que formam bases do espaço do sistema e do ambiente, respectivamente. Para cada termo nos somatórios, escrevemos o traço na mesma base caracterizada por  $i$  e  $l$  dos vetores  $|e_{ij}^S\rangle$  e  $|f_{lk}^B\rangle$ . O que resulta em:

$$\begin{aligned} Tr[P_0\rho_S \otimes \rho_B] &= \sum_{ijklmn} \xi_i \xi_l \lambda_{lk} \lambda_{ij} \langle e_{im}^S| \langle f_{ln}^B| P_0 |e_{ij}^S\rangle |f_{lk}^B\rangle \langle e_{ij}^S| |e_{im}^S\rangle \langle f_{ln}^B| |f_{lk}^B\rangle = \\ &= \sum_{ijkl} \xi_i \xi_l \lambda_{lk} \lambda_{ij} \langle e_{ij}^S| \langle f_{lk}^B| P_0 |e_{ij}^S\rangle |f_{lk}^B\rangle = 0 \end{aligned} \quad (5.10)$$

Como cada  $\xi_i$  e  $\lambda_{ij}$  é não negativo e  $P_0$  é uma matriz positiva semidefinida (o que pode ser verificado a partir de sua definição em função de  $\rho'_{SB}$ ), a igualdade acima exige que  $P_0 |e_{ij}^S\rangle |f_{lk}^B\rangle = 0$  sempre que  $\lambda_{lk}\lambda_{ij} \neq 0$ . Portanto,

$$P_0\rho_{SB} = \sum_{ijk} \xi_i \sqrt{\lambda_{ij}\lambda_{ik}} P_0 |e_{ij}^S\rangle |f_{ij}^B\rangle \langle e_{ik}^S| \langle f_{ik}^B| = 0 \quad (5.11)$$



e  $P_0\chi P_0 = P_0(\rho_{SB} - \rho_S \otimes \rho_B)P_0 = 0$ , garantindo a existência da solução para  $H_\chi$  para qualquer estado  $\rho_{SB}$ .

Tendo a garantia da existência de  $H_\chi$ , sabemos que a transformação de correlação (5.1) sempre poderá ser escrita como

$$\mathcal{E}_\chi[\rho_S(t) \otimes \rho_B(t)] = \rho_S(t) \otimes \rho_B(t) + \chi(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_B(t) - i[[H_\chi(\tau), \rho_S(\tau) \otimes \rho_B(\tau)]] \quad (5.12)$$

A definição mostra que a transformação não é universal, no sentido de que cada conjunto estado separável e correlações terá um operador  $\mathcal{E}_\chi$  responsável pela transformação de correlação específico (definido por  $H_\chi$ ). Além disso, para cada instante é necessário um operador de correlação diferente e a forma do operador de correlação depende do estado do sistema, do ambiente e das correlações a cada instante.

### 5.1.2 Construção do gerador na versão de correlação

Vamos denotar o hamiltoniano do sistema total por  $H_{SB} = H_S + H_B + H_I$ , onde  $H_I$  é o hamiltoniano de interação. O gerador da dinâmica do sistema total, na versão de Schrödinger é  $\mathcal{D}_s[\cdot] = -i[H_{SB}, \cdot]$  e atua no estado do universo,  $\rho_{SB}(t)$ , que pode possuir correlações. Escrever essa mesma equação, mas em função do termo separável do estado total, deve levar a uma equação linear em  $\rho_S(t)$ . Isso é o que faremos através da transformação de correlação. Como desejamos obter exatamente a mesma dinâmica, definimos o operador  $\mathcal{D}_c[\cdot]$  que atuará no termo separável na versão de correlação através de

$$\mathcal{D}_s[\rho_{SB}(t)] = \mathcal{D}_c[\rho_S(t) \otimes \rho_B(t)] \quad (5.13)$$

de forma que obtemos a derivada do sistema de interesse através de

$$\dot{\rho}_S(t) = Tr_B\{\mathcal{D}_c[\rho_S(t) \otimes \rho_B(t)]\}, \quad (5.14)$$

da mesma forma que obteríamos da dinâmica do sistema total na versão de Schrödinger em sua forma tradicional  $\dot{\rho}_S(t) = Tr_B\{\mathcal{D}_s[\rho_{SB}(t)]\}$ .

De (5.13) e (5.12) escrevemos

$$\mathcal{D}_s[\rho_{SB}(t)] = \mathcal{D}_s[\mathcal{E}_\chi[\rho_S(t) \otimes \rho_B(t)]] = \mathcal{D}_c[\rho_S(t) \otimes \rho_B(t)]. \quad (5.15)$$

A partir da equação acima, definimos

$$\mathcal{D}_c[\cdot] \equiv \mathcal{D}_s[\mathcal{E}_\chi[\cdot]] = -i[H_{SB}, \cdot] - [H_{SB}, [[H_\chi, \cdot]]]. \quad (5.16)$$

Essa última equação deixa claro que o gerador da versão de correlação não é universal, já que é explicitamente dependente de  $H_\chi$  que, por sua vez, é função de  $\rho_S(t)$ ,  $\rho_B(t)$  e  $\chi(t)$ . Sendo assim, para cada estado  $\rho_{SB}(t)$ , devemos construir o gerador correspondente levando em conta também o estado do próprio sistema de interesse.

### 5.1.3 Derivação de uma equação universal na forma de Lindblad

Qualquer operador linear, que preserva hermiticidade e aniquila traço pode ser escrito na forma de Lindblad (3.41). O que pode ser verificado pela derivação da seção 3.3 onde o mapa inicial (3.32) é um mapa genérico HPTA e a forma final é do tipo Lindblad.

Da seção anterior, temos que  $\dot{\rho}_S(t) = Tr_B\{\mathcal{D}_c[\rho_S(t) \otimes \rho_B(t)]\}$ . Observando a equação (5.17), percebemos que  $Tr_B\{\mathcal{D}_c[\rho_S(t) \otimes \rho_B(t)]\}$  será um operador linear em  $\rho_S(t)$ . Como  $-i[[A, B]]$  sempre resulta em um operador hermitiano,  $\mathcal{L}(\cdot)$  dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\cdot) = Tr_B\{\mathcal{D}_c[(\cdot) \otimes \rho_B(t)]\} = \\ -iTr_B[ H_{SB}, (\cdot) \otimes \rho_B(t)] - iTr_B[ H_{SB}, -i[[H_\chi, (\cdot) \otimes \rho_B(t)]] ] \end{aligned} \quad (5.17)$$

é um operador linear que preserva hermiticidade. Além disso,  $Tr_S\{\mathcal{L}(\rho_S)\}$ ,  $\rho_S \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_S)$  é o traço total de um comutador, que é sempre nulo pela propriedade cíclica do traço. Um operador com todas essas características será HPTA. Portanto,  $\mathcal{L}(\cdot)$  definido na seção anterior sempre pode ser escrito como um gerador na forma de Lindblad.

Como sabemos que a divisão entre termo unitário e dissipativo e a forma de cada um destes não é única, os operadores que aparecem na equação mestra de (11) são apenas uma das escolhas possíveis. O caminho utilizado chega à seguinte separação entre contribuições unitárias e dissipativas para  $\dot{\rho}_S(t)$ :

$$\dot{\rho}_S(t) = -i[H_S + h_L^\chi(t), \rho_S(t)] + \sum_{i \neq 0, j \neq 0} a_{ij}(t) (2\mathcal{S}_j \rho_S(t) \mathcal{S}_i - \{\mathcal{S}_i \mathcal{S}_j, \rho_S(t)\}). \quad (5.18)$$

Na equação acima, hamiltoniano nu  $H_S$  é somado a

$$h_L^\chi(t) = \langle H_I \rangle_B + 2 \sum_{i \neq 0} Im(c_{i0}(t)) \mathcal{S}_i + \sum_{i \neq 0, j \neq 0} b_{ij}(t) \mathcal{S}_i \mathcal{S}_j, \quad (5.19)$$

onde decomparamos  $H_\chi(t) = \sum_{j=0}^{d_S^2-1} \mathcal{S}_j \otimes \mathcal{B}_j^\chi(t)$  e  $H_I = \sum_{i=1}^{d_S^2-1} \mathcal{S}_i \otimes \mathcal{B}_i$  usando uma base  $\{\mathcal{S}_i\}_{i=0}^{d_S^2-1}$  de operadores hermitianos no espaço de Hilbert do sistema de interesse para a qual  $\mathcal{S}_0 = I$ . Disso se verifica que esta escolha de separação, quando diagonalizada, resultará na representação canônica do superoperador na forma de Lindblad. Já que o dissipador só possui operadores de traço nulo.

Os coeficientes  $b_{ij} = \frac{-i}{2}(c_{ij} - c_{ji}^*)$  e  $a_{ij} = \frac{1}{2}(c_{ij} + c_{ji}^*)$  são dados em função de  $c_{ij}(t) = Tr[\rho_B(t) \mathcal{B}_i \mathcal{B}_j^\chi(t)]$ . Sendo que  $\mathcal{B}_j^\chi(t)$  são contribuições do *correlation parent operator* e  $\mathcal{B}_i$  são contribuições do hamiltoniano de interação. Fica claro que, tanto as taxas de decaimento, quanto a correção no hamiltoniano nu tem contribuições de  $H_\chi$ , que indica a influência das correlações entre o sistema e o ambiente na evolução de  $\rho_S(t)$ .

A matriz formada pelos coeficientes  $a_{ij}$  do termo dissipativo é hermitiana. Isso permite diagonalizá-la e encontrar as taxas de decaimento da forma diagonal de Lindblad, assim como os operadores correspondentes. Porém, essa matriz não precisa ser positiva

semidefinida, permitindo o aparecimento de taxas negativas, que caracterizam dinâmicas não markovianas.

A equação (5.18) é exata e completamente geral. Para qualquer estado  $\rho_{SB}(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_B(t) + \chi(t)$  e qualquer hamiltoniano  $H_{SB} = H_S + H_B + H_I$ , somos capazes de construir uma equação como (5.18) utilizando o *correlation parent operator*  $H_\chi$  correspondente. Sem a necessidade de supor estado separável, interação fraca, estado constante para o ambiente, nem outro tipo de aproximação que poderia levar a uma equação dessa forma por métodos aproximativos propostos anteriormente.

#### 5.1.4 Observações em relação à linearidade de $\mathcal{L}^\chi$

$\mathcal{L}^\chi$  construído como em (5.17) não é um gerador universal, o que significa que não resulta na equação mestra de qualquer  $\rho_S(t)$ . Isso está de acordo com o que esperávamos, já que a dinâmica de um sistema aberto depende das correlações entre o sistema e o ambiente, que não podem ser consideradas independentemente do estado do próprio sistema. Porém, apesar de não ser universal quando desejamos encontrar as equações corretas para a dinâmica, o operador  $\mathcal{L}^\chi$  que construímos é linear e bem definido em todo o espaço  $\mathcal{D}(\mathcal{H}_S)$  de operadores densidade do sistema de interesse.

Para analisar a linearidade de  $\mathcal{L}^\chi$ , vamos usar uma notação mais explícita.  $H_\chi$  é um operador que relaciona um estado separável específico  $\rho_S \otimes \rho_B$  a uma correlação específica  $\chi$ , o que pode ser verificado por (5.3) e (5.4). Por isso, escreveremos  $H_{\chi, \rho_S, \rho_B}$ . Com essa dependência escrita explicitamente, fica claro que  $\mathcal{L}$  definido a partir de (5.17) também é um operador com dependência em  $\chi$ ,  $\rho_S$  e  $\rho_B$ :  $\mathcal{L}_{\rho_S, \rho_B}^\chi$ . E a derivada de um estado  $\rho_S(t) = Tr_B\{\rho_S(t) \otimes \rho_B(t) + \chi(t)\}$  será dada por  $\mathcal{L}_{\rho_S, \rho_B}^\chi \rho_S(t)$ .

Em geral  $\mathcal{L}_{\rho_S, \rho_B}^\chi$  não será o mesmo se modificarmos qualquer um dos operadores  $\chi$ ,  $\rho_S$  e  $\rho_B$ . O que significa que  $\mathcal{L}_{\rho_S, \rho_B}^\chi \rho_S(t) \neq \mathcal{L}_{\rho'_S, \rho'_B}^{\chi'} \rho_S(t)$  para a maior parte dos casos. Porém, como  $\mathcal{L}_{\rho_S, \rho_B}^\chi$  definido a partir de (5.17) é um operador linear, temos que vale

$$\mathcal{L}_{\rho_S, \rho_B}^\chi \left( \sum_i p_i \rho_i \right) = \sum_i p_i \mathcal{L}_{\rho_S, \rho_B}^\chi (\rho_i) \quad (5.20)$$

e, se  $\sum_i p_i \rho_i = \rho_S$ , o lado direito da equação acima dá o resultado físico correto para derivada de  $\rho_S$ . Também podemos supor que o estado do universo é uma mistura

$$\rho_{SB}(t) = \sum_j p_j \rho_{SBj}(t), \quad (5.21)$$

sendo  $\rho_{SBj}(t) = \rho_{Sj}(t) \otimes \rho_{Bj}(t) + \chi_j(t)$ . Como supomos que o universo é fechado, sua evolução será linear, de forma que sempre podemos escrever  $\rho_{SB}(t') = \sum_j p_j \rho_{SBj}(t')$  onde  $\rho_{SBj}(t')$  é dado justamente por  $U(t', t) \rho_{SBj}(t) U^\dagger(t', t)$ .

Disso temos que

$$\mathcal{L}_{\rho_S, \rho_B}^X \rho_{SB} = -i \text{Tr}_B[H_{SB}, \rho_{SB}] = -i \sum_j p_j \text{Tr}_B[H_{SB}, \rho_{SBj}] = \sum_j p_j \mathcal{L}_{\rho_{Sj}, \rho_{Bj}}^{\chi_j}(\rho_{SBj}) \quad (5.22)$$

onde usamos que  $\mathcal{L}_{\rho_{Sj}, \rho_{Bj}}^{\chi_j}(\rho_{Sj})$  é o superoperador que resulta exatamente na derivada de  $\rho_{Sj}$  quando este operador faz parte de um universo composto por  $\rho_{SBj} = \rho_{Sj} \otimes \rho_{Bj} + \chi_j$ . Ou seja,  $\mathcal{L}_{\rho_{Sj}, \rho_{Bj}}^{\chi_j}(\rho_{Sj})$  é definido para resultar no mesmo que  $-i \text{Tr}_B[H_{SB}, \rho_{SBj}]$ .

### 5.1.5 Jaynes-Cummings

Um exemplo em que a solução exata para a equação mestra pode ser aplicada é o modelo de Jaynes-Cummings. Esse é um modelo para a interação entre um átomo de dois níveis e um campo quantizado numa situação em que a diferença de energia entre os estados do átomo e a energia dos fótons do campo são próximas  $\omega \approx \omega_0$ . O hamiltoniano do sistema total é dado por

$$H = \omega a^\dagger a + \frac{\omega_0}{2} \sigma_z + \lambda (\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger) \quad (5.23)$$

Onde  $a$  e  $a^\dagger$  são os operadores de aniquilação e criação no espaço dos fótons,  $\omega_0 \sigma_z / 2$  é o hamiltoniano nu do sistema de dois níveis e  $\lambda (\sigma_+ a + \sigma_- a^\dagger)$  é o hamiltoniano de interação entre o átomo e o campo, sendo  $\lambda$  a constante de acoplamento. A solução exata da evolução descrita por esse hamiltoniano pode ser encontrada para qualquer vetor que representa o estado inicial (46). A solução para um operador densidade segue de forma direta, usando que  $\rho(t) = \sum_i p_i U(t) |\psi_i(0)\rangle \langle \psi_i(0)| U^\dagger(t)$  e a solução para  $|\psi_i(t)\rangle = U(t) |\psi_i(0)\rangle$ . O conhecimento do estado do sistema total a todo instante de tempo permite calcular o *correlation parent operator* para todo  $t$  e assim derivar a equação mestra exata para o sistema.

Tomamos um estado inicial puro  $|\psi(0)\rangle = r_1 |e, 0\rangle + r_2 |g, 1\rangle$  e escolhemos coeficientes  $r_1$  e  $r_2$  reais. Na condição de ressonância  $\omega_0 = \omega$ , a solução é dada por  $|\psi(t)\rangle = e^{-it\omega_0/2} \{ [r_1 \cos(\lambda t) - ir_2 \sin(\lambda t)] |e, 0\rangle + [-ir_1 \sin(\lambda t) + r_2 \cos(\lambda t)] |g, 1\rangle \}$ . Calculamos o operador densidade correspondente a esse estado puro  $\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$ , assim como o operador de correlação, dado por  $\chi(t) = \rho(t) - \text{Tr}_S\{\rho(t)\} \otimes \text{Tr}_B\{\rho(t)\}$ . Tomando os pseudo-inversos dos operadores hermitianos  $\text{Tr}_S\{\rho(t)\}$  e  $\text{Tr}_B\{\rho(t)\}$  e calculando  $P_0$  a partir delas, podemos usar a equação (5.4) para encontrar  $H_\chi$  correspondente a essa evolução. O resultado obtido é

$$\begin{aligned} -2iH_\chi = & \frac{|a_{g,1}|^2}{|a_{e,0}|^2} |e, 0\rangle \langle e, 0| + \frac{a_{g,1} a_{e,0}^*}{|a_{e,0}|^4} |g, 1\rangle \langle e, 0| - |g, 0\rangle \langle g, 0| \\ & - |e, 1\rangle \langle e, 1| + \frac{|a_{e,0}|^2}{|a_{g,1}|^2} |g, 1\rangle \langle g, 1| + \frac{a_{g,1}^* a_{e,0}}{|a_{g,1}|^4} |e, 0\rangle \langle g, 1| \quad (5.24) \end{aligned}$$

Onde  $a_{e,0} = e^{-it\omega_0/2} [r_1 \cos(\lambda t) - ir_2 \sin(\lambda t)]$  e  $a_{g,1} = e^{-it\omega_0/2} [-ir_1 \sin(\lambda t) + r_2 \cos(\lambda t)]$  são os coeficientes que dão o estado total em função do tempo  $|\psi(t)\rangle = a_{e,0}(t) |e, 0\rangle + a_{g,1}(t) |g, 1\rangle$

Para seguir as etapas propostas por (11), devemos escolher uma base de operadores ortonormais e hermitianos no espaço do sistema de interesse. Podemos tomar  $\mathcal{S}_0 = 1/\sqrt{2}$ ,  $\mathcal{S}_1 = \sigma_x/\sqrt{2}$ ,  $\mathcal{S}_2 = \sigma_y/\sqrt{2}$  e  $\mathcal{S}_3 = \sigma_z/\sqrt{2}$ . Onde  $\sigma_x = |e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|$ ,  $\sigma_y = i(|g\rangle\langle e| - |e\rangle\langle g|)$  e  $\sigma_z = |e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|$ . Como essa base é ortonormal, é possível calcular os operadores  $\mathcal{B}_i^X$  de  $H_X = \sum_{i=0}^3 \mathcal{S}_i \otimes \mathcal{B}_i^X$  por  $\mathcal{B}_i^X = Tr_S\{\mathcal{S}_i H_X\}$ . Depois, basta substituir os operadores  $\mathcal{B}_i^X$  e  $\mathcal{B}_i$  na equação (5.18) para encontrar uma equação local no tempo e na forma de Lindblad para o sistema de dois níveis.

A forma final, com o termo dissipativo já diagonalizado é dada por

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_S(t) = -i[H_S + h_L^X(t), \rho_S(t)] + \frac{\gamma_1}{2} \left( \sigma_- \rho_S(t) \sigma_+ - \frac{1}{2} \{ \sigma_+ \sigma_-, \rho_S(t) \} \right) \\ + \frac{\gamma_2}{2} \left( \sigma_+ \rho_S(t) \sigma_- - \frac{1}{2} \{ \sigma_- \sigma_+, \rho_S(t) \} \right) \end{aligned} \quad (5.25)$$

onde  $h_L^X(t) = 4\lambda r_1 r_2 \alpha_1 / (1 + 4r_1^2 - 4r_1^4 - (\alpha_1^2 - \alpha_2^2)) \sigma_z$ ,  $\gamma_1 = -\lambda \alpha_2 / (2 - 2\alpha_1)$  e  $\gamma_2 = \lambda \alpha_2 / (2 + 2\alpha_1)$ . Nessas equações,  $\alpha_1 = (1 - 2r_1^2) \cos(2\lambda t)$  e  $\alpha_2 = (1 - 2r_1^2) \sin(2\lambda t)$ . Como  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  admitem valores positivos e negativos, o sinal das taxas irá oscilar com uma frequência dependente da constante  $\lambda$ , caracterizando uma dinâmica não-markoviana.

### 5.1.6 Observações

As equações que podem ser obtidas pela transformação de correlação não supõem nenhuma característica que restrinja seu domínio de validade como estado inicial separável ou interação fraca. Portanto, esse método demonstra que as equações na forma de Lindblad são gerais. E qualquer caracterização de uma dinâmica quântica que é feita com base em uma equação com essa forma, a princípio, sempre pode ser feita.

O maior problema com a metodologia apresentada é que ela supõe o conhecimento de todo o estado do universo a cada instante de tempo para realizar essa demonstração. Isso torna a aplicabilidade do método extremamente restrita, já que o principal interesse em descrever sistemas abertos é saber como lidar com a evolução de sistemas que interagem com ambientes que não temos acesso ou que são muito difíceis de prever devido à grande quantidade de graus de liberdade que possuem. Por isso, os autores propõe novos métodos aproximativos a partir da transformação de correlação.

## 5.2 Dinâmicas inversíveis - Mapas lineares para correlações iniciais

Uma outra abordagem para encontrar equações mestras exatas na forma de Lindblad para estados correlacionados inicialmente é dada em (12). Essa proposta é mais restritiva do que a anterior, de (11), porque pressupõe a existência de um mapa inversível para a dinâmica sem correlações. A ideia é mostrar que existe um mapa linear e HPTP que sempre pode ser construído para o estado correlacionado a partir do mapa para o estado sem correlações. Nessa construção, se o mapa para o estado separável for inversível, o novo mapa incluindo as correlações também o será. Devido a essa característica,

também é possível encontrar uma equação mestra na forma de Lindblad para um estado inicial correlacionado. Comparando as equações para os casos com e sem correlações, é possível entender como elas alteram a dinâmica. Assim como é esperado e também aparece em (11), o gerador da dinâmica de um estado correlacionado possui um domínio físico restrito, apesar de ser bem definido e preservar hermiticidade e aniquilar traço de todos os operadores densidade no espaço  $\mathcal{L}(\mathcal{H}_S)$  de operadores lineares do sistema reduzido. Embora esse caminho seja menos geral do que o anterior por só ser possível para mapas inversíveis, também exige menos conhecimento sobre o estado global: só necessita da informação do estado inicial do ambiente e das correlações, e não do estado do universo a cada instante de tempo.

Para essa construção, fixa-se o estado inicial do ambiente  $\rho_B(t_0)$  e as correlações iniciais  $\chi(t_0)$ . Como consequência disso, o conjunto  $\mathcal{P}_B^\chi(\mathcal{H}_S)$  de estados do sistema reduzido cuja dinâmica é corretamente descrita pelo mapa construído fica restrito àquele para o qual  $\rho_{SB}(t_0) = \rho_S(t_0) \otimes \rho_B(t_0) + \chi(t_0)$  se mantém um operador positivo. Tendo o mapa  $\Phi(t, t_0)$  para o estado  $\rho_S(t_0) \otimes \rho_B(t_0)$

$$\Phi(t, t_0)[\cdot] = Tr_B\{U(t, t_0)[\cdot] \otimes \rho_B(t_0)U^\dagger(t, t_0)\} \quad (5.26)$$

que pode ser escrito na forma de Kraus como (3.4), o mapa linear considerando  $\rho_S(t_0) \otimes \rho_B(t_0) + \chi(t_0)$  é dado por

$$\Psi^\chi(t, t_0)[\cdot] = \Phi(t, t_0)[\cdot] + I_\chi(t, t_0)Tr\{\cdot\} \quad (5.27)$$

onde  $I_\chi(t, t_0) = Tr_B[U(t, t_0)(\chi(t_0))U^\dagger(t, t_0)]$ . Quando aplicado em  $\rho_S(t_0)$

$$\rho_S(t) = \Phi(t, t_0)\rho_S(t_0) + I_\chi(t, t_0)Tr\{\rho_S(t_0)\} \quad (5.28)$$

igualar-se a (3.61) dentro do domínio físico de validade  $\mathcal{P}_B^\chi(\mathcal{H}_S)$ . É claro que  $\Phi(t, t_0)$  preserva traço e hermiticidade. Como  $Tr\{I_\chi(t, t_0)\} = 0$ , a preservação do traço de qualquer operador é garantida por  $\Phi(t, t_0)$ . E a preservação da hermiticidade é satisfeita porque  $I_\chi(t, t_0) = (I_\chi(t, t_0))^\dagger$ , o que implica em  $I_\chi(t, t_0)Tr\{A\} = (I_\chi(t, t_0)Tr\{A\})^\dagger$  quando  $A = A^\dagger$ . Por isso,  $\Psi^\chi(t, t_0)$  é HPTP (preserva traço e hermiticidade) para todo o espaço de operadores lineares  $\mathcal{L}(\mathcal{H}_S)$ .

Como  $I_\chi(t, t_0)$  é hermitiano, é possível tomar um procedimento muito semelhante ao feito em (3.58) para encontrar a forma de pseudo-Kraus do operador  $I_\chi(t, t_0)Tr\{\cdot\}$  onde o traço é escrito na base de autovetores de  $I_\chi(t, t_0)$ . Como esse operador pode ter autovalores negativos, não precisa ser um operador positivo como definido em (2.7) - nem  $\Psi^\chi(t, t_0)$ . Porém, seguramente  $\Psi^\chi$  é um operador que preserva a positividade do seu domínio físico de validade, pois leva todos os seus elementos aos operadores densidade correspondentes ao estado físico em um instante posterior.

Supondo que  $\Phi(t, t_0)$  é inversível, é possível verificar que a inversa de  $\Psi^\chi(t, t_0)$  é dada por

$$(\Psi^\chi)^{-1}(t, t_0)[\cdot] = \Phi^{-1}(t, t_0)[\cdot] - \Phi^{-1}(t, t_0)[I_\chi(t, t_0)]Tr\{\cdot\}. \quad (5.29)$$

Logo, sob a condição de  $\Phi(t, t_0)$  inversível, é possível construir o gerador

$$\mathfrak{L}^x(t, t_0)[\cdot] = \frac{d}{dt}\Psi^x(t, t_0)(\Psi^x(t, t_0))^{-1}[\cdot] \quad (5.30)$$

tanto para um estado inicial separável, quanto para um correlacionado. Conforme discutimos para (3.55),  $\Psi^x(t, t_0)$  inversível e HPTP é suficiente para obter  $\mathfrak{L}^x(t, t_0)$  HPTA (que preserva hermiticidade e aniquila traço) e pode ser escrito como um termo unitário e um dissipativo na forma de Lindblad, como em (3.41).

Para evidenciar a contribuição das correlações, escrevemos

$$\mathfrak{L}^x(t, t_0)[\cdot] = \mathfrak{L}^{x=0}(t, t_0)[\cdot] + \mathcal{J}^x(t, t_0)Tr\{\cdot\} \quad (5.31)$$

onde  $\mathcal{J}^x = \frac{d}{dt}I^x - \mathfrak{L}^{x=0}[I^x]$  e  $\mathfrak{L}^{x=0}$  é a equação mestra na ausência de correlações. Cada um desses termos preserva hermiticidade e aniquila traço. Conseqüentemente é legítimo vincular a cada um deles uma contribuição unitária e uma dissipativa. Inclusive, através da escolha de operadores de traço nulo no dissipador, projeta-se toda a contribuição unitária de cada um desses termos no comutador e o operador hamiltoniano é obtido de forma única. Uma vez que  $\mathcal{J}^x$  é hermitiano, podemos escrever  $\mathcal{J}^x Tr\{\cdot\}$  como um operador pseudo-Kraus na base de autovetores ortogonais de  $\mathcal{J}^x$ . Sendo

$$\mathcal{J}^x = \sum_j b_j(t) |\eta_j(t)\rangle \langle \eta_j(t)| \quad (5.32)$$

a representação de  $\mathcal{J}^x$  na sua base espectral, escrevemos

$$\mathcal{J}^x Tr\{\cdot\} = \sum_{j,j'} b_j(t) |\eta_j(t)\rangle \langle \eta_{j'}(t)| \cdot |\eta_{j'}(t)\rangle \langle \eta_j(t)|. \quad (5.33)$$

Visto que todos os operadores  $|\eta_j(t)\rangle \langle \eta_{j'}(t)|$  da equação acima são hermitianos ou possuem traço nulo, a projeção de  $\mathcal{J}^x Tr\{\cdot\}$  no termo unitário zera por (3.51). Isso significa que o único termo dependente das correlações nesse superoperador tem projeção não nula apenas no termo dissipativo do superoperador na forma de Lindblad.





## 6 PROPOSTAS ALTERNATIVAS E COMPARAÇÕES

Agora, após a revisão dos dois métodos anteriores propostos na literatura, discutimos como encontrar um superoperador de Lindblad com conhecimento apenas da dinâmica do sistema reduzido por três maneiras diferentes. A primeira é construída a partir de uma generalização do mapa utilizado em (47) para analisar a markovianidade da dinâmica de dois sistemas de dois níveis em contato com um banho térmico. Mostraremos que mapas de pseudo-Kraus sempre podem ser concebidos para sistemas reduzidos cujo hamiltoniano nu comuta com o hamiltoniano de interação, como é o caso analisado no artigo. A inversibilidade desses mapas implica em uma equação mestra local na forma de Lindblad que se resume às equações exatas conhecidas para alguns desses sistemas sob a condição de estado inicial separável. A segunda delas foi demonstrada inicialmente em (13) como uma maneira de associar aos subsistemas energias internas que resultam na energia do sistema total quando somadas. Aqui, observamos que o dissipador escolhido para essa equação dinâmica pode ser adaptado para coincidir com a representação canônica de superoperadores de Lindblad, podendo ser diretamente comparado com os demais métodos. A terceira, através do *replacement map*, é apresentada devido às suas características peculiares, mas que também permitem fazer relações com os outros métodos e analisar as consequências de cada estratégia. Com esse conjunto de possibilidades, comparamos as equações resultantes e discutimos possíveis implicações dessas metodologias na compreensão de características físicas de dinâmicas não-unitárias.

### 6.1 Proposta para encontrar equações mestras exatas para dinâmicas específicas

Começaremos construindo mapas que conectam dois operadores densidade, para depois exigir propriedades típicas para dinâmicas físicas e chegar à primeira proposta. Um mapa entre quaisquer dois operadores densidade específicos  $\rho_A$  e  $\rho_B$  de um mesmo espaço de operadores lineares  $\mathcal{L}(\mathcal{H}_S)$  pode ser definido como

$$V_{AB}[\cdot] = \sum_{ij} \frac{\rho_{Bij}}{\rho_{Aij}} |i\rangle \langle i| \cdot |j\rangle \langle j|, \quad (6.1)$$

onde  $\{|i\rangle\}_{i=1,2,\dots,N}$  é uma base ortonormal de  $\mathcal{H}_S$ . Definido dessa forma, o mapa resulta exatamente em  $\rho_B$  quando atua em  $\rho_A$

$$V_{AB}[\rho_A] = \sum_{ij} \frac{\rho_{Bij}}{\rho_{Aij}} |i\rangle \langle i| \rho_A |j\rangle \langle j| = \rho_B. \quad (6.2)$$

Nesse ponto nos preocupamos apenas em conectar esses dois operadores, sem exigir um comportamento específico quando  $V_{AB}$  atua em outros elementos de  $\mathcal{L}(\mathcal{H}_S)$ . Note que,

apesar de ser um mapa construído a partir de dois operadores densidade específicos, é um mapa linear bem definido para qualquer elemento de  $\mathcal{L}(\mathcal{H}_S)$ . Por exemplo, quando  $V_{AB}$  atua em um operador  $\rho_C$

$$V_{AB}[\rho_C] = \sum_{ij} \frac{\rho_{Bij}}{\rho_{Aij}} |i\rangle \langle i| \rho_C |j\rangle \langle j| = \rho'_C \quad (6.3)$$

resulta em um novo operador linear  $\rho'_C$  cuja entrada de índices  $(i, j)$  é dada por  $\frac{\rho_{Bij}}{\rho_{Aij}} \rho_{Cij}$ . Além disso,  $V_{AB}(\rho_C + \alpha \rho_D) = V_{AB}\rho_C + \alpha V_{AB}\rho_D$  para todo  $\rho_C, \rho_D$  em  $\mathcal{L}(\mathcal{H}_S)$  e todo  $\alpha \in \mathbb{C}$ . Afinal,  $V_{AB}[\cdot]$  é um superoperador linear.

Seguindo na análise das propriedades de  $V_{AB}$ , constatamos que a propriedade (3.7) é satisfeita

$$\frac{\rho_{Bij}^*}{\rho_{Aij}^*} = \frac{\rho_{Bji}}{\rho_{Aji}} \quad (6.4)$$

toda vez que esse mapa é definido a partir de dois operadores densidade, que são hermitianos. Essa propriedade garante que  $V_{AB}$  é um mapa que preserva hermiticidade para qualquer elemento de  $\mathcal{L}(\mathcal{H}_S)$ , não apenas  $\rho_A$ . Portanto, qualquer mapa definido como (6.1) é um mapa linear e HP. Também por  $\rho_A$  e  $\rho_B$  serem dois operadores densidade, de traço 1, é claro que  $V_{AB}$  preserva traço quando atua em  $\rho_A$ . Mas em geral não é um operador TP como definido no capítulo 3. Quando  $V_{AB}$  for TP, ele preservará o traço de todos os operadores lineares em  $\mathcal{H}_S$  e não apenas de  $\rho_A$ . Se desejamos que  $V_{AB}$  seja um operador TP, devemos exigir

$$\sum_i \frac{\rho_{Bii}}{\rho_{Aii}} |i\rangle \langle i| = I \quad (6.5)$$

como em (3.3). A igualdade acima implica em  $\rho_{Bii} = \rho_{Aii}$ ,  $\forall i$ . Essa relação indica que um mapa como (6.1) só será TP quando os operadores densidade  $\rho_A$  e  $\rho_B$  a partir do qual o construímos tiverem exatamente os mesmos elementos na diagonal principal da base utilizada. Ou seja, deverá ser um mapa que não altera os elementos da diagonal de nenhum operador.

Tendo como objetivo representar evoluções temporais de sistemas físicos, os operadores densidade que desejamos conectar são o operador em um instante inicial  $\rho(t_0)$  e o correspondente em um instante posterior  $\rho(t)$ . É possível pensar em  $V_{AB}$  como o superoperador responsável por essa evolução. Para isso, tomamos  $\rho_A = \rho(t_0)$  e  $\rho_B = \rho(t)$ , o mapa torna-se

$$V(t, t_0)[\cdot] = \sum_{ij} \frac{\rho_{ij}(t)}{\rho_{ij}(t_0)} |i\rangle \langle i| \cdot |j\rangle \langle j| \quad (6.6)$$

Da mesma forma que comentamos anteriormente para  $V_{AB}$ , esse mapa é linear e bem definido para todo os operadores densidade do espaço ao qual  $\rho(t_0)$  pertence. Porém, como existe dependência dos coeficientes de  $V(t, t_0)$  nos estados inicial e final, o estado do sistema físico no instante  $t$  só é garantidamente atingido quando  $V(t, t_0)$  atua em um estado inicial específico, aquele que aparece no denominador de (6.6).

Ainda que  $V(t, t_0)$  tenha um domínio de validade restrito, será interessante que ele possua características que preservam as propriedades de operadores densidade que estão além desse domínio. Superoperadores na forma de Lindblad, mesmo quando têm um domínio físico restrito como em (11,12), serão HPTA. O que revela que eles aniquilam traço e preservam hermiticidade de todos os operadores operadores densidade do espaço em que atuam. A derivação do capítulo 3 feita para obter um operador dessa forma não supõe nada a respeito do domínio físico, mas parte de um operador (3.16) que preserva traço e hermiticidade para todos os operadores densidade no espaço de Hilbert em questão. Além disso, um operador na forma de Lindblad é necessariamente HPTA, então só pode ser encontrado a partir de um mapa que satisfaça essas características para todo o espaço de operadores lineares.

### 6.1.1 Hamiltonianos que mantêm a diagonal constante

Nesta seção, vamos entender quais sistemas físicos satisfazem a condição (6.5) que assegura  $V(t, t_0)$  proposto em (6.6) HPTP. Escrevemos o hamiltoniano do sistema total como

$$H = H_S \otimes I + I \otimes H_B + H_I. \quad (6.7)$$

Consideramos uma base ortogonal  $\{\mathcal{B}_i\}$ ,  $i = 1, \dots, N_B^2$  de operadores hermitianos para  $\mathcal{L}(\mathcal{H}_B)$ . Supondo que  $\mathcal{B}_{N_B^2} = I$ , um hamiltoniano de interação qualquer pode ser escrito como

$$H_I = \sum_{i=1}^{N_B^2-1} \mathcal{S}_i \otimes \mathcal{B}_i \quad (6.8)$$

onde  $\mathcal{S}_i$  também precisam ser hermitianos para que  $H_I = H_I^\dagger$ . Como  $H_S$  e cada um dos operadores  $\mathcal{S}_i$  é um operador hermitiano, existe uma base de autovetores ortogonais para cada um desses operadores. Vamos supor que

$$[H_S \otimes I, H_I] = 0. \quad (6.9)$$

Usando a decomposição (6.8), encontramos que  $[H_S, \mathcal{S}_i] = 0 \quad \forall i$ . Essa condição se traduz em uma base de autovetores em comum entre  $H_S$  e cada um dos  $\mathcal{S}_i$ . (15) Desejamos ainda que essa base seja a mesma para todos os operadores que compõem  $H_I$ . Isso é satisfeito se o espectro de  $H_S$  é não-degenerado, que implica que sua base de autoestados será única e, portanto, a mesma de todos os demais  $\mathcal{S}_i$ . (48) Ou, de forma mais geral, também será satisfeito sempre que todos os operadores  $\mathcal{S}_i$  também comutarem entre si. Uma base ortogonal de autovetores em comum para todos os operadores do hamiltoniano (6.7) que atuam em  $\mathcal{H}_S$  resultará em um operador densidade cuja diagonal nessa mesma base se mantém constante ao longo da dinâmica.

Para verificar essa afirmação, tomamos o traço na equação de Liouville para o operador densidade do sistema total  $\rho(t)$ , que resulta na derivada do operador densidade

do sistema reduzido  $S$ . Usamos a notação  $\{|j_S\rangle\}$ ,  $j = 1, \dots, N_S$  para a base de autovetores normalizada que  $H_S$  possui em comum com os operadores  $\mathcal{S}_i$ . Chamaremos por  $v_{ij}$  o autovalor de  $\mathcal{S}_i$  correspondente ao vetor  $|j_S\rangle$  e  $\omega_j$  como o autovalor de  $H_S$  correspondente a esse mesmo vetor.

$$\dot{\rho}_S(t) = -iTr_B[H, \rho(t)] = -i(Tr_B[H_S \otimes I, \rho(t)] + Tr_B[H_I, \rho(t)]). \quad (6.10)$$

Para calcular os dois comutadores resultantes em (6.10), escrevemos  $\rho(t)$  em função da base  $\{|i_S\rangle\}$  de autovetores de  $H_S$  e de uma base ortonormal  $\{|i_B\rangle\}$  do ambiente

$$\rho(t) = \sum_{ijkl} \alpha_{ijkl}(t) |i_S, k_B\rangle \langle j_S, l_B| \quad (6.11)$$

Substituindo em (6.10):

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_S(t) = & -i \sum_{ijkl} \alpha_{ijkl}(t) \left( Tr_B[H_S \otimes I, |i_S, k_B\rangle \langle j_S, l_B|] + \sum_n Tr_B[\mathcal{S}_n \otimes \mathcal{B}_n, |i_S, k_B\rangle \langle j_S, l_B|] \right) = \\ & -i \sum_{ijkl} \alpha_{ijkl}(t) |i_S\rangle \langle j_S| \left( (\omega_i - \omega_j) Tr_B[|k_B\rangle \langle l_B|] + \sum_n (v_{ni} - v_{nj}) Tr_B[\mathcal{B}_n |k_B\rangle \langle l_B|] \right) \end{aligned} \quad (6.12)$$

Se tomarmos os elementos que satisfazem  $i_S = j_S$ , vemos que  $(\omega_i - \omega_j)$  e  $(v_i - v_j)$  zeram a sua contribuição para  $\dot{\rho}_S(t)$ . Então, quando escrevemos o operador densidade reduzido na base de autovetores de  $H_S$ , a diagonal zera desde que uma mesma base seja base de autoestados de  $H_S$  e todos os componentes  $\mathcal{S}_i$  de  $H_I$ .

Quando usamos a versão de interação, essa mesma base também mantém a diagonal do operador densidade constante. Esse fato é consequência de que o hamiltoniano de interação na versão de interação também será um operador que comuta com  $H_S$  sempre que  $[H_S, H_I] = 0$ , onde  $H_I$  é o hamiltoniano de interação na versão de Schrödinger. Observe que a demonstração também é válida para hamiltonianos dependentes do tempo, desde que a condição (6.9) seja satisfeita em conjunto com a comutação dos operadores  $\mathcal{S}_i$  entre si. Nesse caso, a base a ser considerada em (6.11) deve ser a base de autovetores de  $H_S$  no instante de tempo  $t$  em que se deseja calcular a derivada.

### 6.1.2 Construção de um superoperador HPTA

É fácil verificar que operadores como (6.6) podem ser concebidos para dois instantes de tempo  $(t, t_0)$  quaisquer e, ainda, que obedecem uma regra de composição como  $V(t_2, t_0) = V(t_2, t_1)V(t_1, t_0)$  quando construídos seguindo as evoluções temporais  $\rho(t_2)$  e

$\rho(t_1)$  de um mesmo operador densidade inicial  $\rho(t_0)$ :

$$V(t_2, t_1)V(t_1, t_0)[\cdot] = \sum_{i'j'} \frac{\rho_{i'j'}(t_2)}{\rho_{i'j'}(t_1)} |i'\rangle \langle i'| \left( \sum_{ij} \frac{\rho_{ij}(t_1)}{\rho_{ij}(t_0)} |i\rangle \langle i| \cdot |j\rangle \langle j| \right) |j'\rangle \langle j'| = \sum_{ij} \frac{\rho_{ij}(t_2)}{\rho_{ij}(t_0)} |i\rangle \langle i| \cdot |j\rangle \langle j| = V(t_2, t_0)[\cdot]. \quad (6.13)$$

Além de que é possível construir a inversa de (6.6), dada por

$$V^{-1}(t, t_0)[\cdot] = \sum_{ij} \frac{\rho_{ij}(t_0)}{\rho_{ij}(t)} |i\rangle \langle i| \cdot |j\rangle \langle j|. \quad (6.14)$$

Qualquer uma das duas propriedades pode ser usada para produzir um superoperador HPTA que resulta na derivada de  $\rho(t)$  e pode ser disposto na forma de Lindblad (3.41). Pela equação (3.29), o superoperador  $\mathfrak{L}(t)$  será dado pela derivada de (6.6) em relação à primeira entrada quando calculado em  $t_0 = t$ , que resulta em

$$\mathfrak{L}(t)[\cdot] = \sum_{ij} \frac{\dot{\rho}_{ij}(t)}{\rho_{ij}(t)} |i\rangle \langle i| \cdot |j\rangle \langle j|. \quad (6.15)$$

Salientamos que o superoperador  $\mathfrak{L}(t)$  sempre será HPTA porque reduzimos o conjunto dos possíveis  $V(t, t_0)$  àqueles que garantem a preservação da hermiticidade e do traço de qualquer operador linear em  $\mathcal{H}_S$ . Mas a positividade das taxas de decaimento do termo dissipativo dependerá de como o estado em questão muda no instante  $t$ . Através desse procedimento, é possível encontrar como uma contribuição unitária e uma dissipativa na forma de Lindblad podem ser obtidas do próprio operador  $\rho(t)$ .

### 6.1.3 Estado produto e mapa linear

Assim como nos exemplos anteriores de métodos para encontrar equações mestras para estados inicialmente correlacionados, o mapa  $V(t, t_0)$  imaginado em (6.6) em geral possuirá um domínio físico  $\mathcal{P}^\rho(\mathcal{H})$  restrito. Veremos que restringir os possíveis estados iniciais a estados produto com o mesmo operador  $\rho_B(t_0)$  associado ao banho recupera todo o espaço de operadores densidade em  $\mathcal{H}_S$  como domínio físico de validade. Concordando com os mapas exatos tradicionais, que tomam a mesma forma para qualquer operador densidade que evoluem.

Mantemos as condições anteriores que garantem diagonal do operador densidade reduzido constante em alguma base. Quando um estado é produto em um instante  $t_0$ , o operador densidade do universo, dado por (6.11), pode ser reescrito como:

$$\rho(t_0) = \sum_{ij} \beta_{ij}(t_0) |i_S\rangle \langle j_S| \otimes \sum_{kl} \gamma_{kl}(t_0) |k_B\rangle \langle l_B|. \quad (6.16)$$

Tomamos o operador de evolução temporal do universo

$$U(t, t_0) = \exp\{-i(H_S \otimes I + I \otimes H_B + H_I)t\} \quad (6.17)$$

onde consideramos o hamiltoniano constante. O operador densidade do sistema de interesse será dado por:

$$\rho_S(t) = Tr_B\{U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0)\} = \sum_{ij} \beta_{ij}(t_0) |i_S\rangle \langle j_S| f_{ij}(t, t_0) \quad (6.18)$$

onde

$$f_{ij}(t, t_0) = \exp^{-i(\omega_i - \omega_j)t} \times \sum_{kl} \gamma_{kl}(t_0) Tr_B \left[ \exp\{-i(H_B + \sum_n v_{ni} \mathcal{B}_n)t\} |k_B\rangle \langle l_B| \exp\{i(H_B + \sum_n v_{nj} \mathcal{B}_n)t\} \right] \quad (6.19)$$

é uma função que independe do estado inicial do sistema de interesse em questão. Por (6.18), percebemos que cada entrada  $\rho_{Sij}(t)$  na base de autoestados de  $H_S$  é proporcional ao seu valor no inicial  $\beta_{ij}(t_0)$ . E a função  $f_{ij}(t, t_0)$  que dá essa proporcionalidade é a mesma para qualquer operador  $\rho_S(t_0)$  sob a condição de universo em estado produto no instante inicial. Se construirmos o mapa  $V(t, t_0)$  para esse sistema reduzido da forma proposta em (6.6), teremos

$$V(t, t_0)[\cdot] = \sum_{ij} f_{ij}(t, t_0) |i_S\rangle \langle i_S| \cdot |j_S\rangle \langle j_S| \quad (6.20)$$

que é o mapa que representa a evolução temporal de qualquer estado inicial  $\rho_S(t_0)$  quando o estado total em  $t_0$  é separável. Logo, apesar da construção (6.6) se apoiar em um estado inicial específico, ela recupera exatamente o mapa que evolui todo o conjunto de estados iniciais quando esse mapa é possível pela derivação (3.58).

Mais do que isso, a inversa do superoperador (6.20) -cuja existência é verificada por (6.14)-, também independe dos estados do sistema de interesse sob as condições aqui comentadas.

$$V^{-1}(t, t_0)[\cdot] = \sum_{ij} f_{ij}^{-1}(t, t_0) |i_S\rangle \langle i_S| \cdot |j_S\rangle \langle j_S| \quad (6.21)$$

E portanto, é possível encontrar um mapa linear  $V(t_2, t_1)$  para qualquer par de instantes temporais como feito em (3.54), sem dependência no estado  $\rho_S(t)$ , desde que se assuma que o estado do universo é separável em algum instante inicial  $t_0$ .

$$V(t_2, t_1)[\cdot] = V(t_2, t_0)V^{-1}(t_1, t_0)[\cdot] = \sum_{ij} f_{ij}(t_2, t_0)f_{ij}^{-1}(t_1, t_0) |i_S\rangle \langle i_S| \cdot |j_S\rangle \langle j_S| \quad (6.22)$$

Isso significa que a extensão do domínio físico de validade para todo o espaço de operadores densidade se dá igualmente para o superoperador  $\mathfrak{L}(t)$ , ainda que correlações apareçam durante a dinâmica. Os mesmos resultados se aplicam trivialmente quando existe correlações no instante inicial, mas  $\chi(t_0)$  comuta com  $U(t, t_0)$ . Já que, para essas situações, a dinâmica reduzida de  $\rho_S(t)$  só depende do termo separável.

## 6.2 Exemplo: sistema aberto de dois níveis

Observamos a equação (6.15) para  $\mathfrak{L}(t)$  em função de  $\dot{\rho}(t)$  e a separação adotada em (3.33) para chegar aos termos unitário e dissipativo na equação de Lindblad. Podemos constatar que a seleção das entradas de  $\rho_S(t)$  que contribuem com cada um desses termos independem do estado inicial e dos operadores de  $H_I$  que atuam no banho. Mas apenas da base de autovetores em  $\mathcal{H}_S$  definida por  $H_S$  e  $H_I$ . Dessa forma, um procedimento geral pode ser adotado supondo  $\rho_S(t)$  escrito nesse base de autoestados. Nesta seção, veremos como encontrar uma equação na forma de Lindblad para um sistema de dois níveis em contato com um ambiente quântico qualquer sob a condição  $[H_S, H_I] = 0$ .

Empregamos o mapa (6.6) para um operador densidade de um sistema de dois níveis. Usamos a condição (6.5) de diagonal constante que garante preservação do traço nesse superoperador. Supondo  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  a base de autovetores que  $H_S$  possui em comum com os operadores de  $H_I$  que atuam em  $\mathcal{H}_S$ , escrevemos

$$V(t, t_0)(\cdot) = |+\rangle \langle +| \cdot |+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -| \cdot |-\rangle \langle -| + \frac{\rho_{+-}(t)}{\rho_{+-}(t_0)} |+\rangle \langle +| \cdot |-\rangle \langle -| + \frac{\rho_{-+}(t)}{\rho_{-+}(t_0)} |-\rangle \langle -| \cdot |+\rangle \langle +|. \quad (6.23)$$

Definimos  $c_{+-}(t, t_0) = \rho_{+-}(t)/\rho_{+-}(t_0)$  e  $c_{-+}(t, t_0) = \rho_{-+}(t)/\rho_{-+}(t_0)$ .

Escolhemos uma base de operadores ortonormais  $\{F_j, j = 1, \dots, N^2\}$  tal que  $F_{N^2} = I/\sqrt{N}$ . Uma base com essas características no espaço dos operadores de um sistema de dois níveis é composta por

$$F_1 = |+\rangle \langle -| \quad (6.24)$$

$$F_2 = |-\rangle \langle +| \quad (6.25)$$

$$F_3 = \frac{|+\rangle \langle +| - |-\rangle \langle -|}{\sqrt{2}} \quad (6.26)$$

$$F_4 = \frac{I}{\sqrt{2}} = \frac{|+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -|}{\sqrt{2}} \quad (6.27)$$

Nessa base, (6.23) é escrito como:

$$V(t, t_0)(\cdot) = c_{33}(t, t_0)F_3(\cdot)F_3^\dagger + c_{34}(t, t_0)F_3(\cdot)F_4^\dagger + c_{43}(t, t_0)F_4(\cdot)F_3^\dagger + c_{44}(t, t_0)F_4(\cdot)F_4^\dagger, \quad (6.28)$$

onde

$$c_{44}(t, t_0) = 1 + \frac{1}{2} (c_{+-}(t, t_0) + c_{+-}^*(t, t_0)) = 1 + \text{Re}(c_{+-}(t, t_0)) \quad (6.29)$$

$$c_{33}(t, t_0) = 1 - \frac{1}{2} (c_{+-}(t, t_0) + c_{+-}^*(t, t_0)) = 1 - \text{Re}(c_{+-}(t, t_0)) \quad (6.30)$$

$$c_{43}(t, t_0) = \frac{1}{2} (-c_{+-}(t, t_0) + c_{+-}^*(t, t_0)) = -i\text{Im}(c_{+-}(t, t_0)) = c_{34}^*(t, t_0) \quad (6.31)$$

Assumindo que  $\sigma_z = |+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|$ , temos que a derivada de  $\rho(t)$  será dada pelo seguinte superoperador de Lindblad na representação canônica

$$\mathfrak{L}(t)\rho(t) = -i[H(t), \rho(t)] + \mathcal{D}_t(\rho) \quad (6.32)$$

onde o hamiltoniano é dado por

$$H(t) = \frac{1}{2i}\dot{c}_{34}(t, t)\sigma_z = -\frac{1}{2}Im(\dot{c}_{+-}(t, t))\sigma_z = -\frac{1}{2}Im\left(\frac{\dot{\rho}_{+-}(t)}{\rho_{+-}(t)}\right)\sigma_z \quad (6.33)$$

e o dissipador se resume a

$$\mathcal{D}_t(\rho) = \gamma \left[ \sigma_z \rho \sigma_z - \frac{1}{2}\{I, \rho\} \right] \quad (6.34)$$

com uma única taxa de decaimento

$$\gamma = -\frac{1}{2}Re(\dot{c}_{+-}(t, t)) = -\frac{1}{2}Re\left(\frac{\dot{\rho}_{+-}(t)}{\rho_{+-}(t)}\right). \quad (6.35)$$

Como os coeficientes  $c_{ij}(t, t_0)$  em (6.28) formam uma matriz hermitiana, existe uma base em que o mapa é diagonal. A diagonalização da matriz resulta nos autovalores  $\lambda_{\pm} = 1 \pm |c_{+-}(t, t_0)|$ . Também vimos em (3.15) que a positividade de um mapa diagonalizado é garantida quando todos os pesos são positivos e o mapa pode ser escrito na forma de Kraus. Para o mapa desse sistema de dois níveis ser positivo, basta que os dois autovalores sejam não-negativos, o que exige que  $|c_{+-}(t, t_0)| \leq 1$ . Também notamos que o critério para o mapa ser positivo, implica que o mapa atua entre  $t$  e  $t_0$  de forma a diminuir as coerências.

$$|c_{+-}(t, t_0)| \leq 1 \implies |\rho_{+-}(t)/\rho_{+-}(t_0)| \leq 1 \quad (6.36)$$

Se tomamos um mapa para o qual  $|c_{+-}(t, t_0)| > 1$ , esse mapa não será positivo porque não preserva positividade de qualquer operador em  $\mathcal{L}(\mathcal{H}_S)$ . Imagine que tomamos um operador densidade  $\rho$  em  $\mathcal{L}(\mathcal{H}_S)$  para o qual as coerências são as máximas possíveis. Se  $|c_{+-}(t, t_0)| > 1$ , o mapa  $V(t, t_0)$  de (6.23) aumenta as coerências de  $\rho$  e resulta em um operador que não é positivo semidefinido. Por fim, como temos exatamente  $c_{+-}(t, t) = 1$ , é possível mostrar que  $\gamma > 0$  é obtido justamente pelo limite de um  $|c_{+-}(t + \epsilon, t)| \leq 1$ . Ou seja, a taxa é positiva quando a equação é obtida pelo limite de um mapa  $V(t + \epsilon, t)$  positivo.

### 6.2.1 Base alternativa

Argumentamos na seção 3.3.2 que  $H$  e  $\mathcal{D}(\cdot)$  encontrados pelo método demonstrado não devem mudar com uma mudança de base. Desde que sejam satisfeitos os critérios  $\langle F_i, F_j \rangle \equiv tr\{F_i^\dagger F_j\} = \delta_{ij}$  e  $F_{N^2}(t_2, t_1) = I/\sqrt{N}$ ,  $\forall (t_2, t_1)$ . Vamos verificar que isso é verdade adotando uma nova base  $\{G_i\}$  que satisfaz essas condições.

$$G_1 = |+\rangle\langle-| = F_1 \quad (6.37)$$



$$G_2 = \frac{2}{\sqrt{6}} \left( \frac{1}{2} |+\rangle \langle +| - \frac{1}{2} |-\rangle \langle -| + |+\rangle \langle -| \right) = (F_3 + \sqrt{2}F_2) \frac{1}{\sqrt{3}} \quad (6.38)$$

$$G_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} (-|+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -| + |+\rangle \langle -|) = (F_2 - \sqrt{2}F_3) \frac{1}{\sqrt{3}} \quad (6.39)$$

$$G_4 = \frac{I}{\sqrt{2}} = \frac{|+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -|}{\sqrt{2}} = F_4 \quad (6.40)$$

O mapa na nova base é dado por

$$V(t, t_0)(\cdot) = g_{22}(t, t_0)G_2(\cdot)G_2^\dagger + g_{23}(t, t_0)G_2(\cdot)G_3^\dagger + g_{32}(t, t_0)G_3(\cdot)G_2^\dagger + g_{24}(t, t_0)G_2(\cdot)G_4^\dagger + g_{42}(t, t_0)G_4(\cdot)G_2^\dagger + g_{33}(t, t_0)G_3(\cdot)G_3^\dagger + g_{34}(t, t_0)G_3(\cdot)G_4^\dagger + g_{43}(t, t_0)G_4(\cdot)G_3^\dagger + g_{44}(t, t_0)G_4(\cdot)G_4^\dagger \quad (6.41)$$

Onde os novos coeficientes  $g_{ij}$  são dados em função dos antigos  $c_{ij}$  por:

$$g_{44} = c_{44} \quad (6.42)$$

$$g_{33} = \frac{2}{3}c_{33} \quad (6.43)$$

$$g_{22} = \frac{1}{3}c_{33} \quad (6.44)$$

$$g_{34} = g_{43}^* = -\frac{2}{\sqrt{6}}c_{34} \quad (6.45)$$

$$g_{24} = g_{42}^* = \frac{1}{\sqrt{3}}c_{34} \quad (6.46)$$

$$g_{23} = g_{32}^* = g_{32} = -\frac{\sqrt{2}}{3}c_{33} \quad (6.47)$$

O novo operador  $F'(t)$  que formará o hamiltoniano é

$$F'(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (g'_{24}G_2 - g'_{34}G_3) = \frac{C'_{34}}{\sqrt{2}} \left( \frac{1}{\sqrt{3}}G_2 - \frac{2}{\sqrt{6}}G_3 \right) = \frac{C'_{34}}{\sqrt{2}}F_3 = F(t) \quad (6.48)$$

onde  $F(t)$  é o mesmo operador na antiga base e, portanto, o hamiltoniano é o mesmo nas duas bases. Na nova base o dissipador possui quatro termos não nulos

$$\mathcal{D}\rho = \sum_{j,k=1}^{N^2-1} g'_{jk} \left[ G_j \rho G_k^\dagger - \frac{1}{2} \{G_k^\dagger G_j, \rho\} \right] \quad (6.49)$$

com as contribuições de  $g'_{22}$ ,  $g'_{23}$ ,  $g'_{32}$  e  $g'_{33}$ . Mas a diagonalização da matriz formada por esses coeficientes resulta exatamente em um único coeficiente não nulo igual a  $c_{33}$ . E a mudança de base correspondente nos operadores leva a  $F_3$ , resultando exatamente no termo dissipativo obtido em (6.34). Sendo assim, mostramos uma taxa de decaimento é suficiente para obter o termo dissipativo de um sistema de dois níveis sob a ação de um hamiltoniano de interação que comuta com seu hamiltoniano nu.

### 6.2.2 Aplicando a uma evolução específica

Em (47), a markovianidade de um sistema de dois níveis acoplado a outro sistema idêntico e um banho térmico é controlada a partir do estado inicial ou do acoplamento entre os sistemas de dois níveis. Essa conclusão é obtida a partir de uma equação mestra que em geral depende do estado do conjunto desses dois subsistemas. Pelas características da interação entre os componentes do sistema total, é possível encontrar exatamente essa equação através de um mapa como (6.6).

A evolução do universo é regida pelo hamiltoniano

$$H(t) = H_S(t) + \sum_k \hbar \omega_k b_k^\dagger b_k + \frac{S_z}{2} \sum_k \hbar (g_k^* b_k + g_k b_k^\dagger) \quad (6.50)$$

onde  $H_S(t) = \sum_{i=1}^2 \hbar \epsilon_i \sigma_{zi}/2 + \hbar J(t) \sigma_{z1} \sigma_{z2}/2$  é o hamiltoniano nu do conjunto dos dois sistemas de dois níveis, o primeiro somatório é o hamiltoniano do banho de osciladores e o último somatório é o hamiltoniano de interação, para o qual  $S_z = \sigma_{z1} + \sigma_{z2}$ . A função densidade espectral que caracteriza o banho é dada por  $\mathcal{J}(\omega) \equiv \sum_k |g_k|^2 \delta(\omega - \omega_k)$ .

Consideramos que o ensemble de sistemas de dois níveis está em um estado inicialmente separável do estado do banho e tomamos  $\rho_B(0) = \exp(-\sum_k \hbar \omega_k b_k^\dagger b_k / k_B T) / Z$ . Sob essas condições, é possível encontrar a solução exata para a evolução do conjunto de sistemas de dois níveis. A partir da solução para esse conjunto, traça-se no segundo sistema de dois níveis para encontrar  $\rho_{S1}(t)$ , o operador densidade do primeiro sistema de dois níveis em função do tempo. A partir desse operador, todo o procedimento que sugerimos anteriormente é realizável. O mapa encontrando em (47) é

$$V(t, 0, \rho_S(0))[\cdot] = \sum_{k=0,+,-} W_k(t, 0, \rho_S(0)) \cdot W_k^\dagger(t, 0, \rho_S(0)) \quad (6.51)$$

onde  $\rho_S(0)$  é o operador densidade do conjunto dos sistemas de dois níveis,

$$W_0(t, 0, \rho_S(0)) = e^{-\frac{i}{2} \int_0^t d\tau \epsilon_1(\tau)} e^{-\frac{\Gamma(t)}{2}} \sqrt{\frac{\beta(t, \rho_S(0))}{\beta(0, \rho_S(0))}} |_{+1}\rangle \langle_{+1}| + e^{\frac{i}{2} \int_0^t d\tau \epsilon_1(\tau)} e^{-\frac{\Gamma(t)}{2}} \sqrt{\left(\frac{\beta(t, \rho_S(0))}{\beta(0, \rho_S(0))}\right)^*} |_{-1}\rangle \langle_{-1}| \quad (6.52)$$

e

$$W_{\pm}(t, 0, \rho_S(0)) = \sqrt{1 - e^{-\Gamma(t)} \left| \frac{\beta(t, \rho_S(0))}{\beta(0, \rho_S(0))} \right|} |_{\pm 1}\rangle \langle_{\pm 1}|. \quad (6.53)$$

onde usamos as definições a seguir:

$$\beta(t) \equiv e^{i \int_0^t d\tau J(\tau)} \langle_{+1-2}| \rho_S(0) |_{-1-2}\rangle + e^{-i \int_0^t d\tau J(\tau)} \langle_{+1+2}| \rho_S(0) |_{-1+2}\rangle \quad (6.54)$$

$$\gamma(t) \equiv \int d\omega (\mathcal{J}(\omega)/\omega) \sin(\omega t) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \quad (6.55)$$

$$\Gamma(t) \equiv \int_0^t dt' \gamma(t') \quad (6.56)$$

Observamos que (6.51) é uma forma de Kraus de um mapa exatamente como o proposto em (6.6). O que é verificável a partir das relações

$$\beta(0, \rho_S(0)) = \langle +_1 | Tr_2 \{ \rho_S(0) \} | -_1 \rangle = (\rho_{S1}(0))_{+-} \quad (6.57)$$

e

$$e^{-i \int_0^t d\tau \epsilon_1(\tau)} e^{-\Gamma(t)} \beta(t, \rho_S(0)) = (\rho_{S1}(t))_{+-}. \quad (6.58)$$

Por isso, pela seção 6.1.2 sabemos que esse mapa é inversível e admite a construção de um superoperador na forma de Lindblad a partir de sua derivada. Também a equação mestra encontrada em (47) corresponde ao superoperador que é obtido pela equação (6.15) da seção 6.1.2. A equação para  $\rho_{S1}(t)$  resulta em

$$\frac{d}{dt} \rho_{S1}(t) = -\frac{i}{\hbar} [H_{S1}(t), \rho_{S1}(t)] + \frac{\gamma_1(t)}{2} \left( \sigma_{1z} \rho_{S1}(t) \sigma_{1z} - \frac{1}{2} \{ \sigma_{1z}^2, \rho_{S1}(t) \} \right). \quad (6.59)$$

Onde consideramos as definições de (47)

$$H_{S1}(t) \equiv \hbar(\epsilon_1(t) + J_1(t))\sigma_{1z}/2$$

$$J_1(t) \equiv Im \left( \frac{\beta}{|\beta|^2} \frac{d\beta^*}{dt} \right)$$

$$\gamma_1(t) \equiv \gamma(t) - Re \left( \frac{\beta}{|\beta|^2} \frac{d\beta^*}{dt} \right)$$

Comparando o resultado (6.59) com (6.58), (6.33), (6.34) e (6.35), verificamos a equivalência das equações.

O mapa escrito em função dos operadores (6.52) e (6.53) salienta que é possível escrever os superoperadores deste mesmo método em função do estado inicial do universo, dos hamiltonianos nus e das interações quando a solução de  $\rho_{S1}(t)$  a partir destes dados é conhecida. Porém, a forma final dos superoperadores para casos genéricos possuirá dependência no estado inicial do próprio sistema  $\rho_{S1}(t_0)$ .

Observamos também que a dependência no estado do próprio sistema reduzido está contida em  $\beta(t)$ . Em particular, quando o estado inicial dos dois sistemas de dois níveis é um estado produto, temos

$$\langle +_1 -_2 | \rho_S(0) | -_1 -_2 \rangle = (\rho_{S1}(0))_{+-} (\rho_{S2}(0))_{--} \quad (6.60)$$

e

$$\langle +_1 +_2 | \rho_S(0) | -_1 +_2 \rangle = (\rho_{S1}(0))_{+-} (\rho_{S2}(0))_{++}. \quad (6.61)$$

Nesse caso, a função  $\beta(t)$  fica  $\beta(t) = (\rho_{S1}(0))_{+-} f(t, 0)$  onde  $f(t, 0)$  independe do estado de  $\rho_{S1}$ . Toda a dependência dos operadores e das taxas da equação mestra em  $(\rho_{S1}(0))_{+-}$

desaparece devido ao fato de  $\beta(t)$  sempre estar dividido por  $\beta(0)$ . Nas demais circunstâncias, a dependência do mapa no estado inicial do conjunto de sistemas de dois níveis (ou, analogamente, no estado do sistema de interesse no instante atual) não desaparecerá. Essas situações incluem por exemplo a mistura de estados com correlações clássicas estudada na seção 4.3.1. Para a qual as entradas no instante atual não podem ser escritas como (6.18).

Vale ressaltar que a equação mestra para o conjunto de dois sistemas de dois níveis

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar} [H_S(t), \rho_S(t)] + \frac{\gamma(t)}{2} \left( \mathcal{S}_z \rho_S(t) \mathcal{S}_z - \frac{1}{2} \{ \mathcal{S}_z^2, \rho_S(t) \} \right). \quad (6.62)$$

herdada diretamente de  $Tr_B\{U(t, t_0)\rho_S(0) \otimes \rho_B(0)U^\dagger(t, t_0)\}$  e equivalente à derivada de (3.4) também confere com as equações de 6.1.2. Dado que  $I$ ,  $H_S$  e  $\mathcal{S}_z$  são diagonais em uma base  $\{|i_{1,2}\rangle\}$  de autovetores de  $H_S$ , cada superoperador da equação mestra acima é uma combinação de superoperadores do tipo

$$P_i \cdot P_j^\dagger = |i_{1,2}\rangle \langle i_{1,2}| \cdot |j_{1,2}\rangle \langle j_{1,2}|. \quad (6.63)$$

Levando isso em conta, o superoperador  $\mathfrak{L}_S(\rho_S(t))$  equivalente ao comutador e o dissipador de (6.62) pode ser escrito como

$$\mathfrak{L}_S(\cdot) = \sum_{ij} a_{ij}(t) |i_{1,2}\rangle \langle i_{1,2}| \cdot |j_{1,2}\rangle \langle j_{1,2}| \quad (6.64)$$

o que implica que a derivada de  $\rho_S(t)$  é da forma

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = \sum_{ij} a_{ij}(t) |i_{1,2}\rangle \langle i_{1,2}| \rho_S(t) |j_{1,2}\rangle \langle j_{1,2}|. \quad (6.65)$$

Mas substituir  $\dot{\rho}_{ij}(t)$  na equação (6.15) pelos termos da equação acima resulta em um superoperador  $\mathfrak{L}$  proposto exatamente igual a  $\mathfrak{L}_S$  da equação (6.64). Esse resultado mostra que o estado produto  $\rho_S(0) \otimes \rho_B(0)$  não garante apenas a extensão do domínio físico de validade de  $\mathfrak{L}$  proposto para todos os operadores densidade possíveis, como também resgata exatamente o mesmo superoperador linear obtido pelo traço parcial em um universo com estado inicial separável.

### 6.3 Superoperador através da base espectral

Passamos agora para a análise de uma segunda alternativa de construção do superoperador partindo do estado do sistema reduzido. Um resultado extremamente útil para identificar características em sistemas bipartidos é a decomposição de Schmidt. Dado um estado puro  $|\psi(t)\rangle$  de um sistema composto de dois subsistemas S e B, sempre existe uma base ortonormal  $\{|\phi_i^S(t)\rangle\}$  de S e outra  $\{|\phi_i^B(t)\rangle\}$  de B tal que

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^{d^e} \lambda_i(t) |\phi_i^S(t)\rangle \otimes |\phi_i^B(t)\rangle \quad (6.66)$$

onde  $\lambda_i$  são os chamados coeficientes de Schmidt e atendem às relações  $\lambda_i \geq 0$  e  $\sum_i \lambda_i^2 = 1$  (1) e a quantidade de coeficientes de Schmidt  $d^e$  é limitada pelo subsistema de menor dimensão. Essa decomposição é utilizada de forma particularmente interessante em (13, 49), onde define-se a energia interna local dos dois componentes de um universo bipartido por meio da variação dos vetores da base de Schmidt da seguinte forma:

$$H_t^{(k)} = i \sum_{i=1}^{d^e} \frac{d}{dt} |\phi_i^{(k)}(t)\rangle \langle \phi_i^{(k)}(t)|. \quad (6.67)$$

Na equação acima,  $|\phi_i^{(k)}(t)\rangle$  são os vetores de Schmidt de cada subsistema  $k$  em questão. Com esses operadores, encontra-se que a soma dos valores esperados das energias internas dos dois subsistemas se iguala ao valor esperado da energia interna do sistema total. Já nos trabalhos originais é apresentada a equação na forma de Lindblad para a qual esse operador hermitiano atua como um hamiltoniano efetivo da dinâmica do sistema aberto, determinando a contribuição unitária. Essa equação é dada por

$$\mathfrak{L}_t^{(k)}(\rho^{(k)}) = -i[H_t^{(k)}, \rho^{(k)}] + \mathcal{D}_t^{(k)}(\rho^{(k)}) \quad (6.68)$$

onde  $H_t^{(k)}$  é o operador definido em (6.67) e

$$\mathcal{D}_t^{(k)}(\rho^{(k)}) = \sum_{ij} \gamma_{ij}(t) \left( G_{ij}^{(k)}(t) \rho(t) (G_{ij}^{(k)}(t))^\dagger - \frac{1}{2} \{ (G_{ij}^{(k)}(t))^\dagger G_{ij}^{(k)}(t), \rho(t) \} \right). \quad (6.69)$$

Sendo  $G_{ij}^{(k)}(t) = |\phi_i^{(k)}(t)\rangle \langle \phi_j^{(k)}(t)|$  e  $\gamma_{ij}(t) = \frac{1}{d^e \lambda_j^2} \frac{d}{dt} \lambda_i^2$ . Uma vez que a base de Schmidt de um estado puro é justamente a que diagonaliza os operadores densidade reduzidos, constatamos que as equações acima podem ser generalizadas para qualquer estado reduzido substituindo os vetores de Schmidt pelos autovetores ortonormais do operador densidade. Mantemos em mente, porém, que esse procedimento é especialmente atraente quando alguém deseja definir energias locais e aditivas para sistemas quânticos abertos sem fazer uso de aproximações.

Nas discussões a seguir, selecionamos a base espectral de um operador densidade qualquer:

$$\rho(t) = \sum_{i=1}^{d^e} \lambda_i^2(t) |\phi_i(t)\rangle \langle \phi_i(t)|. \quad (6.70)$$

Aqui escrevemos os autovalores como  $\lambda_i^2(t)$  em menção aos coeficientes  $\lambda_i(t)$  da base de Schmidt do sistema total para um estado puro. E  $d^e$  pode ser considerado como a quantidade de autovalores não nulos de  $\rho(t)$ . A derivada desse operador pode ser descrita por um superoperador construído exatamente como (6.68) onde o hamiltoniano (6.67) e o dissipador (6.69) ficam em função dos autovetores de (6.70).

### 6.3.1 Dissipador

Veremos que apenas alguns termos do dissipador (6.69) alteram a dinâmica do estado reduzido. O que implicará que  $\mathcal{D}_t^p$  não é somente um dissipador na forma de

Lindblad, mas também pode ser escrito apenas em função de operadores de traço nulo. Denotamos cada termo do somatório (6.69) por  $D_{ij}$

$$D_{ij} = \gamma_{ij}(t) \left( G_{ij} \rho G_{ij}^\dagger - \frac{1}{2} \{ G_{ij}^\dagger G_{ij}, \rho \} \right). \quad (6.71)$$

Com isso, o dissipador total fica escrito como

$$\mathcal{D}_t^\rho(\rho(t)) = \sum_{ij} D_{ij}(t). \quad (6.72)$$

Lembrando que os vetores  $|\phi_i(t)\rangle$  e os autovalores  $\lambda_i^2(t)$  são os mesmos da base espectral (6.70), encontramos

$$G_{ij} \rho G_{ij}^\dagger = \lambda_j^2 |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \quad (6.73)$$

e

$$\frac{1}{2} \{ G_{ij}^\dagger G_{ij}, \rho \} = \frac{1}{2} \{ |\phi_j\rangle \langle \phi_j|, \rho \} = \lambda_j^2 |\phi_j\rangle \langle \phi_j| \quad (6.74)$$

o que resulta em

$$D_{ij} = \frac{1}{d^e} \frac{d}{dt} \lambda_j^2 \lambda_i^2 (|\phi_i\rangle \langle \phi_i| - |\phi_j\rangle \langle \phi_j|) = \frac{1}{d^e} \frac{d}{dt} \lambda_i^2(t) (|\phi_i\rangle \langle \phi_i| - |\phi_j\rangle \langle \phi_j|). \quad (6.75)$$

De onde podemos notar que  $D_{ii} = 0$  e

$$D_{ij} = -D_{ji} \left( \frac{d}{dt} \lambda_i^2(t) \right) / \left( \frac{d}{dt} \lambda_j^2(t) \right). \quad (6.76)$$

A primeira conclusão implica que apenas os operadores  $G_{ij}(t)$  com  $i \neq j$  são necessários. Como os vetores da base espectral são ortogonais, cada operador desse tipo possui traço nulo. A segunda relação implica que podemos tomar apenas a metade dos operadores restantes, por exemplo aqueles para os quais  $j > i$ . Um novo dissipador equivalente ao primeiro pode ser escrito como

$$D_t^\rho(\cdot) = \sum_{i \neq j} \gamma_{ij}(t) \left( G_{ij} \cdot G_{ij}^\dagger - \frac{1}{2} \{ G_{ij}^\dagger G_{ij}, \cdot \} \right). \quad (6.77)$$

Como todos os operadores possuem traço nulo, esse dissipador tem projeção nula no termo hamiltoniano. Isso significa que a projeção de

$$L_t^\rho(\cdot) = -i[H_t^\rho, \cdot] + D_t^\rho(\cdot) \quad (6.78)$$

no termo unitário é apenas o próprio comutador. E  $H_t^\rho$  deve coincidir com o hamiltoniano obtido por (3.41) a menos de um operador proporcional à identidade.

### 6.3.2 Comparação com o método proposto

Para dois níveis, onde  $\frac{d}{dt} \lambda_i^2(t) = -\frac{d}{dt} \lambda_j^2(t)$ , temos

$$D_{ij} = D_{ji} \quad (6.79)$$

e é necessário apenas um termo -e uma taxa- para descrever a contribuição dissipativa. Agora, observe que o superoperador  $\mathfrak{L}_t^\rho$  para um sistema de dois níveis fica apenas

$$\mathfrak{L}_t^\rho(\cdot) = -i(H_t^\rho \cdot I - I \cdot H_t^\rho) + \gamma \left( G^\dagger G \cdot I - \frac{1}{2}I \cdot G^\dagger G - \frac{1}{2}G \cdot G^\dagger \right). \quad (6.80)$$

É possível comparar esse superoperador com o obtido na seção 6.2 em que a consideramos a diagonal do operador densidade constante em alguma base. Para seguir essa comparação, consideramos que  $\rho(t)$  possui a diagonal constante na mesma base tomada naquela seção. De forma geral, os autovetores de um operador densidade reduzido de um sistema de dois níveis serão combinações lineares de  $|+\rangle$  e  $|-\rangle$ . Escrevemos autovetores normalizados genéricos como

$$|\phi_1(t)\rangle = \alpha_1(t)|+\rangle + \beta_1(t)|-\rangle \quad (6.81)$$

$$|\phi_2(t)\rangle = \alpha_2(t)|+\rangle + \beta_2(t)|-\rangle \quad (6.82)$$

enquanto  $\lambda_1^2$  e  $\lambda_2^2$  são os autovalores relacionados a  $|\phi_1(t)\rangle$  e  $|\phi_2(t)\rangle$ , respectivamente.

A seção anterior indica uma arbitrariedade no termo dissipador. Escolheremos  $D_t^\rho(\rho) = D_{12}$ . Adotando a mesma base  $\{F_j\}$  da seção 6.2, notamos que  $G_{12} \cdot G_{12}^\dagger$  possui um termo não nulo do tipo  $F_1 \cdot F_1^\dagger$

$$\gamma_{12}G_{12} \cdot G_{12}^\dagger = \frac{\frac{d}{dt}\lambda_1^2}{2\lambda_2^2}|\alpha_1(t)|^2|\beta_2(t)|^2|+\rangle\langle-| \cdot |-\rangle\langle+| \quad (6.83)$$

e que não pode ser anulado por nenhum dos outros superoperadores que compõem (6.80). Portanto,  $\mathfrak{L}_t^\rho$  possui um elemento não nulo ortogonal ao superoperador  $\mathfrak{L}$  obtido na seção 6.2. Esse é apenas um dentre os termos de  $L_t^\rho$  com essa característica e outros termos desse tipo poderiam ser obtidos escolhendo  $D_t^\rho(\rho) = D_{21}$ .

Como a decomposição de um superoperador na base  $\{F_j\}$  é única, concluímos que o superoperador construído aqui e o proposto na seção anterior são diferentes. Apesar disso, ambos são igualmente válidos para obter a derivada do operador  $\rho(t)$  a partir do qual foram construídos. Um sendo o operador que leva cada entrada à sua derivada e o outro levando os vetores e pesos da base espectral às suas derivadas. A conclusão de que os superoperadores não são os mesmos não é absurda, porque o seu domínio físico é restrito. Esses superoperadores precisariam ser iguais se exigíssemos que atuassem da mesma forma em todo o espaço de operadores lineares do sistema reduzido.

Não é somente o termo dissipativo que difere entre os superoperadores obtidos por cada método, mas também o hamiltoniano. Enquanto o hamiltoniano (6.33) é sempre proporcional a  $\sigma_z$ , o hamiltoniano obtido pela base espectral de um operador densidade

com diagonal principal constante será

$$\begin{aligned} \frac{H}{i\hbar} = & \frac{1}{2} \left( \frac{b'(t)}{b(t)} - \left( \frac{b'(t)}{b(t)} \right)^* \right) |+\rangle \langle +| \\ & - \frac{(-1 + 2a)(b^*(t)b'(t) + (b'(t))^*b(t))}{2b^*(1 - 4a + 4a^2 + 4|b(t)|^2)} |+\rangle \langle -| + \\ & \frac{(-1 + 2a)(b^*(t)b'(t) + (b'(t))^*b(t))}{2b(1 - 4a + 4a^2 + 4|b(t)|^2)} |-\rangle \langle +| \end{aligned} \quad (6.84)$$

onde  $b(t) = \rho_{+-}(t)$ ,  $b'(t) = \frac{d}{dt}b(t)$  e  $a = \rho_{++}(t) = \rho_{++}(0)$ . Esse hamiltoniano não pode ser equivalente ao anterior de (6.33) porque diferem por um operador que não é proporcional à identidade.

Os superoperadores também não possuem o mesmo domínio físico de validade, o que pode ser verificado supondo que o estado inicial do universo é um estado produto. Em (6.18) vimos que as coerências de  $\rho(t)$  nessa base se igualam a  $b(t) = b_0 f(t)$  onde  $b_0 = b(0)$  e  $f(t)$  é o mesmo para todos os  $\rho(0)$  quando o operador densidade do universo no instante inicial é produto. Para estes casos, o domínio físico do superoperador proposto em 6.1.2 se estende para todos os operadores densidade no espaço do sistema de interesse, assim como acontece para os mapas inversíveis da seção 5.2. O mesmo não acontece aqui para o superoperador  $L_t^\rho$ . Substituindo  $b(t) = b_0 f(t)$  em (6.84), os elementos não-diagonais continuam dependendo do estado inicial do sistema reduzido.

Os hamiltonianos dos dois métodos somente equivalem na ausência de interação, quando ficamos apenas com  $b(t) = e^{-iw_2 t} b_0$ . Nesse caso teremos

$$b^*(t)b'(t) + (b'(t))^*b(t) = 0 \quad (6.85)$$

e

$$\frac{1}{2} \left( \frac{b'(t)}{b(t)} - \left( \frac{b'(t)}{b(t)} \right)^* \right) = -iw_2 \quad (6.86)$$

que resulta em  $H = \hbar w_2 |+\rangle \langle +|$ .

## 6.4 Replacement map

Por fim, comentamos a respeito de uma última estratégia. Esta não apresenta grandes benefícios em relação às demais, mas ajuda a esclarecer certos efeitos.

Tomamos o mapa

$$\Phi_R^t(\cdot) = \rho(t) \text{Tr}\{\cdot\} \quad (6.87)$$

que leva qualquer operador linear  $A$  em  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$  a  $\rho(t) \text{Tr}\{A\}$ . Em particular, para todos operadores de traço um, o resultado da operação é exatamente  $\rho(t)$ . Logo, é possível escrever a evolução de um estado inicial  $\rho(t_0)$  como

$$\Phi_R^t(\rho(t_0)) = \rho(t) \quad (6.88)$$



se escolhermos  $\rho(t)$  como o operador que coincide exatamente com o estado físico do sistema que começa em  $\rho(t_0)$ . O mesmo pode ser feito para associar um operador à sua derivada. Como a derivada  $\dot{\rho}(t)$  do operador densidade é também um operador hermitiano, existe uma base de autovetores ortonormais  $\{|\psi_i(t)\rangle\}$  e autovalores  $v_i(t)$  reais que diagonaliza  $\dot{\rho}(t)$ :

$$\dot{\rho}(t) = \sum_i v_i(t) |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)| \quad (6.89)$$

O mapa  $\Psi_R^t(\cdot)$  que leva  $\rho(t)$  à sua derivada  $\dot{\rho}(t)$  pode ser escrito como

$$\Psi_R^t(\cdot) = \sum_i v_i(t) |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)| \text{Tr}\{\cdot\}. \quad (6.90)$$

Na realidade,  $\Psi_R^t(\cdot)$  leva qualquer operador de traço 1 a  $\dot{\rho}(t)$ . No entanto, pode adquirir significado físico quando aplicado em  $\rho(t)$ , pois é um superoperador que leva o operador densidade à sua derivada, assim como diversos outros superoperadores  $\mathfrak{L}$  que apresentamos. Ademais,  $\Psi_R^t(\cdot)$  é HPTA e pode ser colocado em uma forma de pseudo-Kraus se usarmos a base  $\{|\psi_i(t)\rangle\}$  para escrever o traço:

$$\Psi_R^t(\cdot) = \sum_{ij} v_i(t) |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_j(t)| \cdot |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_i(t)|. \quad (6.91)$$

Os autovalores reais garantem que  $\Psi_R(\cdot)$  preserva hermiticidade e

$$\sum_{ij} v_i(t) |\psi_j(t)\rangle \langle \psi_i(t)| \psi_i(t)\rangle \langle \psi_j(t)| = I \text{Tr}\{\rho'(t)\} = I \frac{d}{dt} \text{Tr}\{\rho(t)\} = 0 \quad (6.92)$$

implica que o mapa aniquila traço. Uma consequência dessas características é que  $\Psi_R^t(\cdot)$  pode ser tomado em uma forma de Lindblad.

Contudo, quando selecionamos a parte unitária de  $\Psi_R^t(\cdot)$  através do mesmo procedimento de (3.41) em que se calcula a projeção desse superoperador em um termo unitário, obtemos um hamiltoniano nulo. Isso acontece porque, assim como em (3.51), todos os operadores  $|\psi_i(t)\rangle \langle \psi_j(t)|$  da forma de pseudo-Kraus são hermitianos ou possuem traço nulo. Esse resultado significa que nunca encontramos uma contribuição unitária da dinâmica por  $\Psi_R^t(\cdot)$  se definimos o hamiltoniano através de uma projeção do superoperador em um termo com a forma do comutador de (3.41). E o termo dissipativo encontrado pelo mesmo método é formado por operadores de traço nulo e não pode ser escrito como um termo unitário. Entretanto não fizemos nenhuma suposição a respeito do estado ou da derivada (6.89). O estado  $\rho(t)$  poderia corresponder, por exemplo, a uma evolução unitária, para a qual esperaríamos a presença apenas do termo unitário. Esse exemplo demonstra que as características atribuídas à evolução são altamente dependentes da escolha do mapa utilizado para conduzi-la.

#### 6.4.1 Exemplo

Vamos considerar novamente um sistema de dois níveis cuja diagonal do operador densidade se mantém constante ao longo do tempo em alguma base. A derivada do

operador nessa mesma base é expressa da seguinte forma:

$$\rho'(t) = p(t) |+\rangle \langle -| + p^*(t) |-\rangle \langle +|. \quad (6.93)$$

É simples verificar que o superoperador  $\Phi_R^t$  abaixo

$$\begin{aligned} \Phi_R^t(\cdot) = \rho'(t) Tr\{\cdot\} = \\ p(t) [|+\rangle \langle +| (\cdot) |+\rangle \langle -| + |+\rangle \langle -| (\cdot) |-\rangle \langle -|] + \\ p^*(t) [|-\rangle \langle +| (\cdot) |+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -| (\cdot) |-\rangle \langle +|], \end{aligned} \quad (6.94)$$

tem projeção total nula no termo unitário. Para isso, basta substituir cada termo, por exemplo, na expressão (3.47).

Alternativamente, poderíamos verificar esse resultado diretamente pelas características dos operadores construídos através da base espectral. Na base de autovetores a derivada do operador densidade fica

$$\rho'(t) = |p(t)| |p+(t)\rangle \langle p+(t)| - |p(t)| |p-(t)\rangle \langle p-(t)| \quad (6.95)$$

onde

$$|p+(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |+\rangle + \frac{p^*(t)}{|p(t)|} |-\rangle \right) \quad (6.96)$$

e

$$|p-(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |+\rangle - \frac{|p(t)|}{p(t)} |-\rangle \right). \quad (6.97)$$

Definindo  $G_{ij}(t) \equiv |p_i(t)\rangle \langle p_j(t)|$ ,  $\lambda_+(t) = |p(t)|$ ,  $\lambda_-(t) = -|p(t)|$  e construindo  $\Psi_R^t$  como em (6.91), teremos

$$\Psi_R^t(\cdot) = \sum_{i,j=+,-} \lambda_i(t) \left( G_{ij}(t) (\cdot) G_{ij}^\dagger(t) \right) \quad (6.98)$$

de onde se verifica pela mesma equação (3.47) ou analogamente por (3.51) que a projeção no termo unitário é nula. Também conseguimos ver que esses operadores não são funções simples dos operadores de Pauli:

$$G_{++}(t) = \frac{1}{2} \left( I + \frac{1}{|p(t)|} [Re(p(t))\sigma_x - Im(p(t))\sigma_y] \right) \quad (6.99)$$

$$G_{--}(t) = \frac{1}{2} \left( I - \frac{1}{|p(t)|} [Re(p(t))\sigma_x - Im(p(t))\sigma_y] \right) \quad (6.100)$$

$$G_{+-}(t) = G_{-+}^\dagger(t) = \frac{1}{2} \left( \sigma_z + \frac{1}{|p(t)|} [iIm(p(t))\sigma_x + iRe(p(t))\sigma_y] \right) \quad (6.101)$$

Todavia, o operador

$$\sum_{i,j=+,-} \lambda_i(t) G_{ij}^\dagger(t) G_{ij}(t) = 0 \quad (6.102)$$

pode ser adicionado a  $\Psi_R^t$ , convertendo-o em um termo dissipativo na forma de Lindblad

$$\Psi_R^t(\cdot) = \sum_{i,j=+,-} \lambda_i(t) \left( G_{ij}(t)(\cdot)G_{ij}^\dagger(t) + \{G_{ij}^\dagger(t)G_{ij}(t), \cdot\} \right). \quad (6.103)$$

Nestes superoperadores,  $p(t)$  poderia ser substituído por  $\rho'_{+-}(t)$  dos exemplos da seção 6.2 ou pela solução (4.33) do modelo de *dephasing*. A comparação mais direta entre este superoperador e os das seções citadas é através de (6.94). Com essa forma é evidente que nenhum dos superoperadores que a compõem aparecem, por exemplo em (6.28). Além de não serem iguais, esses superoperadores possuem domínios físicos diferentes: enquanto o mapa proposto na seção 6.1.2 consegue estender seu domínio a depender das condições iniciais, esse mapa é exclusivo para a dinâmica cuja derivada é exatamente dada por  $\rho'(t)$ .

## 6.5 Comparações e observações

As técnicas utilizadas para encontrar um superoperador exato na forma de Lindblad para um sistema quântico aberto são variadas. E podem propor superoperadores diferentes para uma mesma dinâmica. Sabemos que existem métodos para definir um termo unitário e um dissipativo de forma única para cada superoperador, como vimos na seção 3.3.3. Ainda assim, a determinação desses termos não é óbvia porque o próprio superoperador não é único. É necessário se atentar a isso porque costumamos atribuir significado físico a esses termos. Para que esse entendimento seja válido, é preciso que a escolha do mapa também seja adequada.

Por exemplo, através dos mapas inversíveis propostos no trabalho (12) apresentado na seção 5.2, alguém poderia interpretar que as correlações de um sistema com o ambiente nunca exercem um papel no sistema reduzido que poderia ser associado a uma operação unitária. Mas isso não necessariamente é verdade. A função das correlações é representada somente no dissipador da equação porque foi feita uma escolha de mapa linear específica. A projeção de  $\mathcal{J}^x Tr\{\cdot\}$  no termo unitário zera exatamente pelos mesmos motivos que a do *Replacement map*  $\Psi_R^t(\cdot)$ . Ambos foram escolhas para representar a dinâmica de um sistema aberto através de superoperadores lineares no operador densidade reduzido. No caso do mapa  $\mathcal{L}^x$  da seção (12) de mapas inversíveis, a decisão é por definir um único mapa que descreve a evolução de todos os estados reduzidos com mesma evolução unitária, estado do ambiente e operador de correlação. Mas esses operadores de correlação podem representar diversas interações entre o sistema de interesse e o ambiente. E não deixam claras as diferenças, por exemplo, entre correlações clássicas e quânticas. Quando poderíamos esperar diferentes funções das correlações nos estados reduzidos a depender dessas características.

Um método que discorda dessa ausência de efeito das correlações no hamiltoniano é a alternativa que propusemos na seção 6.1.2. Ela deve ser um dos casos englobados na seção 5.2 porque o mapa para estado inicial separável é linear e inversível, como

verificado na seção 6.1.3. Porém, pelo exemplo dado em 6.2.2 e, mais especificamente pela equação (6.2.2), averiguamos que o hamiltoniano encontrado não se mantém o mesmo independentemente da presença de correlações. Devido à sua dependência em  $\beta(t)$ , esse operador pode mudar para um estado inicial correlacionado quando comparado a um estado sem correlações. A mesma comparação pode ser feita com o hamiltoniano da seção 5.1 sobre a versão de correlação, apontado nas equações (5.18) e (5.19). Essa equação é geral porque a versão de correlação é aplicável a qualquer dinâmica. Em particular, descreve também dinâmicas inversíveis. Mas o hamiltoniano na representação canônica, assim como na seção 6.1.2, possui termos adicionais quando há correlações entre o sistema e o ambiente. Quando olhamos para o superoperador construído a partir da base espectral, vemos que as possibilidades são ainda maiores. Essa equação dinâmica possui alterações no hamiltoniano efetivo mesmo para casos em que o estado inicial é um estado produto. Situações em que o método que propusemos e o para dinâmicas inversíveis da seção 5.2 concordam.

É previsível que divergências entre os superoperadores não se restrinjam apenas aos hamiltonianos. E essa expectativa é claramente comprovada com a comparação da seção 6.3.2 entre os termos do dissipador do método pela base espectral e o que propusemos. Mas as diferenças podem atingir qualquer hamiltoniano, dissipador e taxas de equações dinâmicas que contabilizem as correlações. Porque a única exigência para esses superoperadores é que a sua ação seja a mesma quando atuarem em operadores densidade dentro dos seus domínios físicos de validade.

## 7 CONCLUSÃO

Conforme a ciência e as tecnologias quânticas avançam, aumenta a necessidade e a possibilidade de compreender dinâmicas de sistemas quânticos abertos. Sabemos que nenhum sistema quântico acessível é completamente isolado e inevitavelmente sofrerá com os efeitos da interação com o ambiente. Porém, o entendimento de como esses efeitos alteram os estados reduzidos pode ajudar a conter os impactos negativos ou explorar propriedades desejáveis.

Dentre quantificadores importantes que caracterizam sistemas abertos, mencionamos o extenso uso daqueles que se baseiam nas equações dinâmicas locais. Vimos que equações locais que preservam hermiticidade e traço (características essenciais de operadores densidade) sempre podem ser dispostas como uma soma de dois termos: unitário e dissipativo. As arbitrariedades internas a cada termo e na separação entre eles podem ser reduzidas com exigências para os valores dos traços dos operadores e diagonalização do dissipador. Contudo, a generalidade dessas equações ainda é questionada à medida que as derivações mais conhecidas fazem uso de aproximações e suposições excludentes. Uma resposta decisiva a esses questionamentos foi apresentada recentemente em (11), onde mostrou-se a validade de equações na forma de Lindblad para sistemas quânticos abertos quaisquer. Do mesmo modo, a equação dinâmica na forma de Lindblad desenvolvida em (13) para um subsistema de um universo bipartido em estado puro pode ser concebida para qualquer operador densidade a partir da sua base espectral. Nós analisamos ainda a possibilidade revelada em (12) de construir equações mestras para dinâmicas inversíveis que contabilizam a contribuição das correlações iniciais. E propusemos a identificação de equações dinâmicas na forma de Lindblad para subsistemas cujo hamiltoniano nu comuta com o hamiltoniano de interação. Essas duas últimas alternativas recuperam as equações tradicionais obtidas para dinâmicas inversíveis e estados iniciais separáveis.

Os superoperadores de todos esses métodos possuem um domínio físico de validade restrito. Essa característica é consequência da inclusão, sem aproximações, de correlações na descrição. É preciso abrir mão de um domínio físico de validade completamente geral para cada superoperador específico se quisermos que o método de construção desses superoperadores seja possível para qualquer estado inicial. Porque isso significa que a equação dinâmica terá termos dependentes do operador de correlação, que não é fisicamente compatível com qualquer operador densidade reduzido. Como só precisam evoluir da mesma forma os operadores que estão na intersecção dos seus domínios físicos de validade, os superoperadores obtidos por diferentes métodos não precisam ser iguais. E de fato não são. Verificamos que os superoperadores podem diferir entre si pela existência ou ausência de componentes inteiras de uma base ortogonal de superoperadores. Mesmo quando

restringimos a análise aos superoperadores que recuperam os resultados tradicionais para estados iniciais separáveis, vemos que eles podem discordar entre si em aspectos importantes como o hamiltoniano efetivo na representação canônica (que elimina a arbitrariedade na escolha desse termo).

Essas discordâncias requerem profunda atenção se a intenção é atribuir significado físico à forma e características desses operadores. No exemplo que discutimos, os dois últimos métodos discordam em relação à alteração do hamiltoniano efetivo pelas correlações. Esse hamiltoniano, por sua vez, poderia ser associado à energia interna do sistema, e diferentes estratégias de linearização da dinâmica reduzida levariam a conclusões diversas sobre o efeito das correlações nessa propriedade. Com isso, dois caminhos se mostram naturais para as tentativas de generalização de medidas baseadas nas equações mestras de Lindblad. O primeiro é escolher um método em detrimento de outros devido a aspectos mais convenientes do superoperador resultante. No entanto, é importante notar que o método mais vantajoso também pode mudar de acordo com os objetivos. Por exemplo, aquele que utiliza a decomposição espectral pode ser atraente para identificar energias internas efetivas. Já para caracterizar markovianidade, pode ser priorizado um superoperador que recupere um domínio físico de validade extenso para estados iniciais separáveis. Possuindo, ao menos nesses casos, as mesmas propriedades das equações mestras markovianas tradicionais. Um segundo caminho é sustentar as caracterizações em cada dinâmica individual, levando em consideração um estado inicial específico do sistema reduzido. Isso evita que as conclusões estejam apoiadas em uma separação artificial entre sistema e ambiente mais correlações. Ao final, essa segunda direção pode recair novamente sobre uma medida análoga de uma equação na forma de Lindblad. Por exemplo, uma medida de uma dinâmica em que  $H_S$  comuta com  $H_I$  a respeito de como mudam as coerências na base de autovetores do hamiltoniano deve implicar em uma medida equivalente baseada na equação mestra obtida pelo método que propusemos. Bem como a atribuição de certas qualidades à dinâmica reduzida através da decomposição espectral do operador densidade pode ser equivalente à identificação de superoperadores e termos unitário e dissipativo como nas referências (13, 49).

Em síntese, a completa abrangência de equações de Lindblad para sistemas abertos foi verificada recentemente. Ao mesmo tempo, métodos menos gerais que (11), mas ainda muito menos restritivos que as hipóteses de correlação inicial nula e acoplamento fraco se mostram como opções para o estudo das propriedades destes sistemas. Cada uma dessas possibilidades pode ser mais vantajosa conforme o contexto e os objetivos. Entretanto, associar superoperadores lineares locais a dinâmicas físicas quaisquer traz como custo a restrição do domínio físico de validade de cada superoperador. Isso implica, em particular, que as diferentes estratégias para encontrar superoperadores HPTA que dão a dinâmica reduzida não precisam ser equivalentes. O que pode levar a interpretações físicas contraditórias a respeito das origens de certos efeitos observados. É essencial, portanto,

que qualquer análise feita através dessas equações dinâmicas justifique a escolha de um método específico ou seja independente dessa indeterminação.





## REFERÊNCIAS

- 1 NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. **Quantum computation and quantum information**: 10th anniversary edition. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.
- 2 LADD, T. D. *et al.* Quantum computers. **Nature**, Springer Science and Business Media LLC, v. 464, n. 7285, p. 45–53, Mar. 2010. DOI: 10.1038/nature08812.
- 3 GAUGER, E. M. *et al.* Sustained quantum coherence and entanglement in the avian compass. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 106, p. 040503, Jan. 2011. DOI: 10.1103/PhysRevLett.106.040503.
- 4 TIERSCH, M.; BRIEGEL, H. J. Decoherence in the chemical compass: the role of decoherence for avian magnetoreception. **Philosophical Transactions of the Royal Society A: mathematical, physical and engineering sciences**. The Royal Society Publishing, v. 370, n. 1975, p. 4517–4540, 2012. DOI: 10.1098/rsta.2011.0488.
- 5 HALL, M. J. W. *et al.* Canonical form of master equations and characterization of non-markovianity. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 89, p. 042120, Apr. 2014. DOI: 10.1103/PhysRevA.89.042120.
- 6 BERNARDES, N. K. *et al.* Experimental observation of weak non-markovianity. **Scientific Reports**, Springer Science and Business Media LLC, v. 5, n. 1, Dec. 2015. DOI: 10.1038/srep17520.
- 7 RIVAS, A.; HUELGA, S. F.; PLENIO, M. B. Quantum non-markovianity: characterization, quantification and detection. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 77, n. 9, p. 094001, Aug. 2014. DOI: 10.1088/0034-4885/77/9/094001.
- 8 ALICKI, R. The quantum open system as a model of the heat engine. **Journal of Physics A: mathematical and general**, v. 12, n. 5, p. L103, May 1979. DOI: 10.1088/0305-4470/12/5/007.
- 9 LINDBLAD, G. On the generators of quantum dynamical semigroups. **Communications in Mathematical Physics**, Springer Science and Business Media LLC, v. 48, n. 2, p. 119–130, June 1976. DOI: 10.1007/bf01608499.
- 10 GORINI, V.; KOSSAKOWSKI, A.; SUDARSHAN, E. C. G. Completely positive dynamical semigroups of n-level systems. **Journal of Mathematical Physics**, American Institute of Physics, v. 17, n. 5, p. 821–825, 1976. DOI: 10.1063/1.522979.
- 11 ALIPOUR, S. *et al.* Correlation-picture approach to open-quantum-system dynamics. **Physical Review X**, American Physical Society, v. 10, p. 041024, Nov. 2020. DOI: 10.1063/1.522979.
- 12 COLLA, A.; NEUBRAND, N.; BREUER, H.-P. Initial correlations in open quantum systems: constructing linear dynamical maps and master equations. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 24, n. 12, p. 123005, Dec. 2022. DOI: 10.1088/1367-2630/aca709.

- 13 MALAVAZI, A. H. A. **On the energetic analysis of autonomous quantum systems**. Tese (Doutorado) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2022. DOI: 10.11606/T.76.2022.tde-17082022-092344.
- 14 SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. **Modern quantum mechanics**. 2nd. ed. Cambridge: University Press, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1017/9781108499996>.
- 15 COHEN-TANNOUJDI, C.; DIU, B.; LALOE, F. **Quantum mechanics**. New York: Wiley–VCH, June 1986. v.1.
- 16 COSTA FILHO, J. **Quantum non-Markovianity induced by classical stochastic noise**. Dissertação (Mestrado) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2017. DOI: 10.11606/d.76.2017.tde-10102017-155811.
- 17 SHANKAR, R. **Principles of quantum mechanics**. New York: Springer, 1994.
- 18 EKERT, A.; HOSGOOD, T. **Introduction to quantum information science**. Disponível em: <https://qubit.guide>. Acesso em: 16 de janeiro de 2023.
- 19 RIVAS, A.; HUELGA, S. F. **Open quantum systems**. Berlin: Springer, 2012.
- 20 BREUER, H.-P.; PETRUCCIONE, F. **The theory of open quantum systems**. Oxford: Oxford University Press, 2007.
- 21 HAYDEN, P.; SORCE, J. A canonical hamiltonian for open quantum systems. **Journal of Physics A: mathematical and theoretical**, IOP Publishing, v. 55, n. 22, p. 225302, May 2022. DOI: 10.1088/1751-8121/ac65c2.
- 22 ŠTELMACHOVIČ, P.; BUŽEK, V. Dynamics of open quantum systems initially entangled with environment: beyond the kraus representation. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 64, p. 062106, Nov. 2001. DOI: 10.1103/PhysRevA.64.062106.
- 23 PAZ-SILVA, G. A.; HALL, M. J. W.; WISEMAN, H. M. Dynamics of initially correlated open quantum systems: theory and applications. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 100, p. 042120, Oct. 2019. DOI: 10.1103/PhysRevA.100.042120.
- 24 BREUER, H.-P. Non-markovian generalization of the lindblad theory of open quantum systems. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 75, p. 022103, Feb. 2007. DOI: 10.1103/PhysRevA.75.022103.
- 25 ZHANG, D.-J.; LIU, C.-L.; TONG, D.-M. Dynamics of open systems with affine maps\*. **Chinese Physics Letters**, Chinese Physical Society and IOP Publishing, v. 32, n. 4, p. 040302, Apr. 2015. DOI: 10.1088/0256-307X/32/4/040302.
- 26 JORDAN, T. F. Affine maps of density matrices. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 71, p. 034101, Mar. 2005. DOI: 10.1103/PhysRevA.71.034101.
- 27 SARGOLZAH, I. Necessary and sufficient condition for the reduced dynamics of an open quantum system interacting with an environment to be linear. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 102, p. 022208, Aug. 2020. DOI: 10.1103/PhysRevA.102.022208.

- 
- 28 DOMINY, J. M.; SHABANI, A.; LIDAR, D. A. A general framework for complete positivity. **Quantum Information Processing**, Springer, v. 15, p. 465–494, 2016. DOI: 10.1007/s11128-015-1148-0.
- 29 PECHUKAS, P. Reduced dynamics need not be completely positive. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 73, p. 1060–1062, Aug. 1994. DOI: 10.1103/PhysRevLett.73.1060.
- 30 REICHL, L. E. **A modern course in statistical physics**. 2nd. ed. New York: Wiley-VCH, 1999.
- 31 BREUER, H.-P.; LAINE, E.-M.; PILO, J. Measure for the degree of non-markovian behavior of quantum processes in open systems. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 103, p. 210401, 2009. DOI: 10.1103/PhysRevLett.103.210401.
- 32 BREUER, H.-P. Foundations and measures of quantum non-markovianity. **Journal of Physics B: atomic, molecular and optical physics**, IOP Publishing, v. 45, n. 15, p. 154001, July 2012. DOI: 10.1088/0953-4075/45/15/154001.
- 33 ALIPOUR, S. *et al.* Entropy-based formulation of thermodynamics in arbitrary quantum evolution. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 105, p. L040201, Apr. 2022. DOI: 10.1103/PhysRevA.105.L040201.
- 34 BENATTI, F.; NARNHOFER, H. Entropy behaviour under completely positive maps. **Letters in Mathematical Physics**, Springer Science and Business Media LLC, v. 15, n. 4, p. 325–334, May 1988. DOI: 10.1007/bf00419590.
- 35 OU, C.; CHAMBERLIN, R. V.; ABE, S. Lindbladian operators, von neumann entropy and energy conservation in time-dependent quantum open systems. **Physica A: statistical mechanics and its applications**, v. 466, p. 450–454, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physa.2016.09.016>.
- 36 ABE, S. Time evolution of rényi entropy under the lindblad equation. **Physical Review E**, American Physical Society, v. 94, p. 022106, Aug. 2016. DOI: 10.1103/PhysRevE.94.022106.
- 37 KRYSZEWSKI, S.; CZECHOWSKA-KRYSZK, J. **Master equation** - tutorial approach. 2008. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/0801.1757>. Acesso em: 18 de Maio de 2023.
- 38 RIVAS, Á. *et al.* Markovian master equations: a critical study. **New Journal of Physics**, v. 12, n. 11, p. 113032, Nov. 2010. DOI: 10.1088/1367-2630/12/11/113032.
- 39 MANZANO, D. A short introduction to the Lindblad master equation. **AIP Advances**, v. 10, n. 2, Feb. 2020. ISSN 2158-3226. 025106. DOI: 10.1063/1.5115323.
- 40 FARINA, D.; GIOVANNETTI, V. Open-quantum-system dynamics: Recovering positivity of the redfield equation via the partial secular approximation. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 100, p. 012107, July 2019. DOI: 10.1103/PhysRevA.100.012107.
- 41 ZWANZIG, R. Ensemble method in the theory of irreversibility. **Journal of Chemical Physics**, AIP Publishing, v. 33, n. 5, p. 1338–1341, 1960. DOI: 10.1063/1.1731409.

- 42 PALMA, G. M.; SUOMINEN, K.-A.; EKERT, A. Quantum computers and dissipation. **Proceedings of the Royal Society of London Series A: mathematical, physical and engineering sciences**. The Royal Society London, v. 452, n. 1946, p. 567–584, 1996. DOI: 10.1098/rspa.1996.0029.
- 43 DOLL, R. *et al.* On the conundrum of deriving exact solutions from approximate master equations. **Chemical Physics**, v. 347, n. 1, p. 243–249, 2008. ISSN 0301-0104. Ultrafast Photoinduced Processes in Polyatomic Molecules. DOI: 10.1016/j.chemphys.2007.09.003.
- 44 DJORDJEVIĆ, D. S. Explicit solution of the operator equation  $a^*x+x^*a=b$ . **Journal of Computational and Applied Mathematics**, v. 200, n. 2, p. 701–704, 2007. ISSN 0377-0427. DOI: 10.1016/j.cam.2006.01.023.
- 45 BEN-ISRAEL, A.; GREVILLE, T. N. E. **Generalized inverses: theory and applications**. 2nd. ed. New York: Springer, 2003. (CMS book in mathematics v. 15).
- 46 LOUISELL, W. H. **Quantum statistical properties of radiation**. New York: John Wiley, 1973.
- 47 BRITO, F.; WERLANG, T. A knob for markovianity. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 17, n. 7, p. 072001, July 2015. DOI: 10.1088/1367-2630/17/7/072001.
- 48 GLORIOSO, P. **On common eigenbases of commuting operators**. Disponível em: [https://ocw.mit.edu/courses/8-04-quantum-physics-i-spring-2013/9ccc9fd132124dd102e1a7863e6e12ce\\_MIT8\\_04S13\\_OnCommEigenbas.pdf](https://ocw.mit.edu/courses/8-04-quantum-physics-i-spring-2013/9ccc9fd132124dd102e1a7863e6e12ce_MIT8_04S13_OnCommEigenbas.pdf). Acesso em: 24 de abril de 2023.
- 49 MALAVAZI, A. H. A.; BRITO, F. A schmidt decomposition approach to quantum thermodynamics. **Entropy**, MDPI AG, v. 24, n. 11, p. 1645, Nov. 2022. DOI: 10.3390/e24111645. ISSN 1099-4300.