

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA  
MESTRADO ACADÊMICO EM FÍSICA TEÓRICA

---

**Termodinâmica Quântica**  
Termalização de sistemas quânticos de baixa dimensionalidade

---

Guilherme Monteiro Oliveira

Porto Alegre - RS  
Brasil  
2015



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA  
MESTRADO ACADÊMICO EM FÍSICA TEÓRICA

---

**Termodinâmica Quântica**  
Termalização de sistemas quânticos de baixa dimensionalidade

---

*Autor:*

Guilherme Monteiro Oliveira

*Orientador:*

Prof. Dr. Sílvio Renato Dahmen

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação  
em Física do Instituto de Física - UFRGS como requisito  
parcial à obtenção do grau de Mestre em Física.

Porto Alegre - RS  
Brasil  
2015



# Conteúdo

<b>Agradecimentos</b>	<b>i</b>
<b>Resumo</b>	<b>iii</b>
<b>Abstract</b>	<b>v</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>vii</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Ferramentas Teóricas</b>	<b>7</b>
2.1 Operador de evolução temporal . . . . .	9
2.2 Resposta Linear . . . . .	10
2.3 Matriz densidade Reduzida . . . . .	12
<b>3 Reservatório de energia</b>	<b>15</b>
<b>4 Decoerência Quântica</b>	<b>18</b>
<b>5 Temperatura</b>	<b>23</b>
<b>6 Sistemas Diagonais</b>	<b>26</b>
6.1 Sistemas não degenerados . . . . .	26
6.2 Sistema paramagnético - Spins não interagentes . . . . .	39
<b>7 Sistemas Interagentes</b>	<b>43</b>
7.1 Heisenberg-XYZ . . . . .	44
7.2 Spins com interação perturbativa . . . . .	45
<b>8 Discussões e conclusões</b>	<b>50</b>
8.1 Perspectivas . . . . .	52
<b>Bibliografia</b>	<b>56</b>
<b>A Logaritmo e exponencial de matrizes não-diagonais</b>	<b>57</b>

<b>B</b>	<b>Código: Python3 e C/C++</b>	<b>59</b>
<b>C</b>	<b>Erro de ensemble e propagação</b>	<b>67</b>

# Agradecimentos

Agradeço à Professora Dra. Sandra Denise Prado pelas discussões referentes aos efeitos quânticos apresentados neste trabalho. Agradeço, também, ao Professor Dr. Roberto da Silva por sempre fazer perguntas e comentários importantes ao trabalho. Gostaria de agradecer o Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) por financiar este trabalho.





# Resumo

O objetivo deste trabalho é elucidar alguns aspectos sobre termalização e decoerência em sistemas quânticos de baixa dimensionalidade. Para este fim, estudamos alguns sistemas com estrutura de níveis diferentes. Primeiro analisamos um sistema semelhante ao oscilador harmônico, isto é, um sistema sem degenerescência. Em seguida, analisamos um sistema de spins com e sem interação. Com o estudo destes sistemas, fomos capazes de determinar quando e como um sistema quântico perde correlação entre seus níveis de energia e atinge um estado estacionário com pesos de Boltzmann. Discutimos, também, alguns conceitos importantes na transição de uma Termodinâmica tradicionalmente clássica para uma abordagem quântica, como entropia, temperatura e reservatório de energia.



# Abstract

Our objective in this work is to elucidate some aspects about thermalization and decoherence in low dimensional quantum systems. To do so, we study some systems with different energy level structures. First we analyse a harmonic oscillator akin system, that is, a system without degenerescence. Then, we analyse a system of spins with and without interaction. Studing these systems, we were able to determine how and when a quantum system loses correlation between its energy levels and reaches a stationary state given by the Boltzmann distribution. We also discuss important concepts about the transition between a Classical Thermodynamics and its quantum counterpart. Some of these concepts are entropy, temperature and energy reservoir.



# Lista de Figuras

4.0.1 Matriz densidade de um spin acoplado . . . . .	19
4.0.2 Intensidade de interação vs estrutura do sistema . . . . .	20
4.0.3 Distribuição de níveis de energia para interação fraca . . . . .	21
4.0.4 Decoerência em sistema quântico puro . . . . .	22
6.1.1 Diagrama $\Delta \times \Gamma$ para sistema diagonal sem degenerescência . . . . .	28
6.1.2 Esquema de ressonâncias entre reservatório e sistema . . . . .	29
6.1.3 Histograma e gráfico $\Gamma = \Delta$ . . . . .	30
6.1.4 Evolução $\Gamma = \Delta$ de sistema com 3 níveis . . . . .	31
6.1.5 Entropia, energia média e $\beta_s$ no caso $\Gamma = 2\Delta$ . . . . .	32
6.1.6 Histograma e grafo $\Gamma = 2\Delta$ . . . . .	32
6.1.7 Evolução $\Gamma = 2\Delta$ de sistema com 3 estados . . . . .	33
6.1.8 Entropia, energia média e $\beta_s$ para $\Gamma = \Delta$ . . . . .	33
6.1.9 Histograma e gráfico $\Gamma = \frac{\Delta}{2}$ . . . . .	34
6.1.10 Evolução $\Gamma = \frac{\Delta}{2}$ de sistema com 3 níveis . . . . .	34
6.1.11 Entropia, energia média e $\beta_s$ para $\Gamma = \frac{\Delta}{2}$ . . . . .	35
6.1.12 Diagrama $\Gamma \times \Delta$ para condições iniciais aleatórias . . . . .	36
6.1.13 Decoerência de um sistema de 3 níveis para diferentes interações . . . . .	37
6.1.14 Dinâmica de termalização de sistemas com 2, 3 e 4 níveis. . . . .	37
6.1.15 Picos de entropia . . . . .	38
6.1.16 Evolução de $\beta_s$ para um sistema de 2, 3 e 4 níveis . . . . .	38
6.1.17 Probabilidades versus temperatura espectral . . . . .	39
6.2.1 Dinâmica, entropia e $\beta_s$ de spins paramagnéticos . . . . .	40
6.2.2 Probabilidades locais de sistema paramagnético . . . . .	41
6.2.3 Temperatura e magnetização local de sistema paramagnético . . . . .	41
7.1.1 Dinâmica de um sistemas Heisenberg-XZ . . . . .	45
7.2.1 Distribuição de probabilidades de sistema de spins interagentes . . . . .	47
7.2.2 $\beta_s$ , entropia e magnetização de um sistema de spins interagentes . . . . .	48
7.2.3 Entropia, $\beta_s$ e decoerência de reservatório . . . . .	49



# Capítulo 1

## Introdução

Com o surgimento da Mecânica Clássica, tornou-se possível, ao menos em princípio, explicar o movimento de partículas em todo o universo: planetas, estrelas, maçãs, etc. Em algumas correntes filosóficas mais radicais supõe-se que dadas a posição e a velocidade de todas as partículas do universo em algum instante de tempo, poderíamos determinar suas posições e velocidades em qualquer outro instante de tempo.

Embora esta ideia pareça bastante atrativa, atualmente ela se configura como uma possibilidade pouco plausível, uma vez que um único mol<sup>1</sup> de uma substância tem aproximadamente  $10^{23}$  partículas desta substância. Por outro lado, a busca por simulações computacionais de sistemas cada vez maiores vem atraindo a atenção de investidores em campos como física molecular, engenharia de materiais, meteorologia, medicina, etc.

Mesmo supondo que temos acesso à tecnologia necessária para realizar um estudo microscópico de algum sistema de interesse, em muitos casos podemos obter informações suficientes sobre este usando-se de poucas propriedades macroscópicas destes imensos sistemas – pressão, volume, temperatura,...

Com base em estudos fenomenológicos Joule, Kelvin, Celsius, Fahrenheit, entre outros desenvolveram a Termodinâmica [1, 2]. Embora esta teoria pareça um tanto rudimentar se comparada a tantas outras da atualidade, ela se encontra no cerne da Revolução Industrial, por exemplo, um dos maiores acontecimentos na história da humanidade.

Com o nascimento da Mecânica Quântica [3, 4], observou-se a possibilidade de explicar diversos fenômenos clássicos através desta nova teoria. O surgimento da teoria de espaço de fases para a Mecânica Quântica (*Phase Space Quantum Mechanics*) [5, 6], por exemplo, procura unir ideias próprias da Mecânica Clássica ao formalismo quântico.

Juntamente com essa possibilidade de conexão entre o mundo clássico e quântico, percebeu-se que a Termodinâmica também deveria ter um berço quântico. Baseados nesta consideração, muitos autores [7, 8, 9, 10] propuseram diversas abordagens quânticas para a Termodinâmica ou a já então conhecida Mecânica Estatística [11, 12]. Por outro lado, nenhum destes trabalhos conseguiu estabelecer uma trajetória conclusiva entre estas duas

---

<sup>1</sup>Definido como a quantidade de substância que contém tantas partículas quanto átomos em 12 gramas de carbono-12.

teorias.

Nos alicerces da Termodinâmica e, por continuidade, da Mecânica Estatística existe um princípio variacional, onde entropia e energia desempenham um papel importante. Em essência, uma vez que a entropia de um certo sistema é máxima, a energia média deste sistema deve ser mínima. A partir deste momento, dizemos que o sistema alcançou um estado de equilíbrio termodinâmico, ou seja, o sistema *termalizou* ou, em outras palavras, entrou em equilíbrio térmico.

Tendo que a entropia deve ser maximizada a fim de determinarmos qual é o estado de equilíbrio do sistema em estudo, von Neumann [7] propôs o que é comumente denominado por “entropia de von Neumann”<sup>2</sup>,

$$S = -Tr(\rho \log(\rho)), \quad (1.0.1)$$

onde  $\rho$  é a matriz densidade de um certo sistema,  $\log(\cdot)$  é a função logaritmo natural e  $Tr(\cdot)$  representa a função traço. Como, em geral, esta matriz densidade é não-diagonal, seu cálculo não é direto. Por outro lado, a função traço independe da base na qual a matriz se encontra. Desta forma, podemos simplesmente diagonalizar a matriz densidade  $\rho$  e proceder da seguinte forma:

$$S = -\sum_k \lambda_k \log(\lambda_k), \quad (1.0.2)$$

onde  $\lambda_k$  são os autovalores da matriz densidade. No apêndice A mostramos como o logaritmo natural e a exponencial de uma matriz diagonalizável podem ser calculados.

Do ponto de vista quântico, esta equação é encarada como uma equivalente à entropia clássica de Gibbs. Algumas de suas principais propriedades são [13]:

- $S(\rho)$  é zero se e somente se o sistema é puro;
- O máximo valor de entropia é aquele em cujo todos os níveis de energia do sistema têm a mesma probabilidade;
- Dadas duas matrizes densidade diferentes,  $\rho_A$  e  $\rho_B$ ,  $S(\rho_A \otimes \rho_B) \leq S(\rho_A) + S(\rho_B)$  é sempre verdade, onde a igualdade ocorre para sistemas não interagentes;
- $S(\rho) = S(U\rho U^\dagger)$ , onde  $U$  é uma matriz de transformação unitária.

Dado que a entropia de von Neumann é nula para estados puros [3, 4], mas maior que zero para sistemas interagentes, compreendemos seu significado: podemos interpretá-la como uma medida da mistura entre sistemas. Em outras palavras, se dois sistemas inicialmente puros passam a interagir, a entropia de ambos passará de zero para um certo valor finito. Zurek [14] propõe, inclusive, que exista uma associação entre esta definição de entropia e o processo de decoerência quântica.

---

<sup>2</sup>Definida sem a presença da constante de Boltzmann.



Dado o critério de equilíbrio termodinâmico, podemos usar a equação (1.0.1) para calcular a distribuição de probabilidades de equilíbrio de qualquer sistema sujeito a uma restrição de energia. Entretanto, antes é necessário determinar como uma matriz densidade  $\rho$  evolui no tempo.

Dada a definição de matriz densidade [3, 15]

$$\rho(t) = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|, \quad (1.0.3)$$

podemos analisar sua evolução temporal a partir da equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi(t)| = \langle \Psi(t)| H. \quad (1.0.4)$$

Tomando a derivada temporal de (1.0.3) e substituindo as correspondentes equações de Schrödinger, temos:

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H, \rho(t)]. \quad (1.0.5)$$

Assumindo o estado de equilíbrio estacionário, isto é,  $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ , a matriz densidade e a Hamiltoniana deste sistema devem possuir uma base diagonal em comum, ou seja,  $[\rho, H] = 0$ . Desta forma, podemos maximizar a entropia de von Neumann com certa facilidade, tratando apenas das formas diagonais de  $\rho$  e  $H$ . Como a energia esperada do sistema em equilíbrio térmico deve ser constante e a matriz densidade deve estar normalizada, usamos o método de multiplicadores de Lagrange. Definindo a função a ser maximizada, temos

$$\Xi(\lambda_i, \alpha_0, \alpha_2) = - \sum_k \lambda_k \log(\lambda_k) + \alpha_0 \left( \sum_k E_k \lambda_k - \langle E \rangle \right) + \alpha_1 \left( \sum_k \lambda_k - 1 \right), \quad (1.0.6)$$

onde  $\lambda_i$  são os autovalores da matriz densidade,  $E_i$  os autovalores de energia e  $\alpha_i$  os multiplicadores de Lagrange.

Derivando e igualando a zero, podemos isolar a probabilidade de cada nível de energia. Obtemos

$$\lambda_k = \alpha_1 e^{\alpha_0 E_k}. \quad (1.0.7)$$

A fim de determinar as constantes acima, podemos substituir este resultado na entropia de von Neumann novamente e compararmos com a entropia de Gibbs<sup>3</sup> de equilíbrio para o ensemble canônico, onde a energia esperada do sistema é conservada:

$$S = \log(Z) + \beta \langle E \rangle. \quad (1.0.8)$$

---

<sup>3</sup>Neste trabalho tomamos a constante  $k_B$  de Boltzmann igual a 1.

Obtemos

$$S = -\alpha_0 \sum_k \alpha_1 E_k e^{\alpha_0 E_k} - \sum_k \alpha_1 e^{\alpha_0 E_k} \log(\alpha_1). \quad (1.0.9)$$

Desta forma, temos que

$$\alpha_0 = -\beta = -\frac{1}{T} \quad \alpha_1 = Z^{-1} = \left( \sum_k e^{-\beta E_k} \right)^{-1}, \quad (1.0.10)$$

onde  $Z$  é conhecida com o função partição de um ensemble canônico.

Substituindo estes resultados e usando o fato de que tanto a matriz densidade quanto o Hamiltoniano deste sistema apresentam uma base diagonal comum quando em regime estacionário, a distribuição de probabilidades responsável por maximizar a entropia é dada por [3, 4, 8]

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Tr}(e^{-\beta H})}. \quad (1.0.11)$$

Por completude, temos que o ensemble canônico é definido como aquele onde, embora o número de partículas seja constante, a energia interna do sistema pode variar dependendo da temperatura imposta a ele pelo reservatório térmico. O que o difere do ensemble microcanônico, onde mesmo a energia interna é constante.

Uma vez que o sistema está em equilíbrio térmico com um dado reservatório com temperatura fixa, este sistema pode ser descrito pela distribuição (1.0.11), a distribuição de Boltzmann. Em outras palavras, a distribuição de Boltzmann descreve o estado de equilíbrio de um sistema em contato térmico com um reservatório de energia com temperatura fixa.

Dada a *Hipótese de Termalização de Autoestado* (Eigenstate Thermalization Hypothesis) [12, 16], um sistema termodinâmico (ou seja, com infinitos graus de liberdade) sempre entra em equilíbrio térmico. Entretanto, um sistema quântico menor pode, em tempos assintóticos, ter sua entropia maximizada, mas não apresentar uma distribuição de Boltzmann ao interagir.

Embora a equação de Schrödinger seja determinística, o Princípio de Incerteza de Heisenberg insere uma série de correlações (quânticas) entre os variados níveis de energia de um considerado sistema. Com a existência do comutador  $[q, p] = i\hbar$ , temos o surgimento de probabilidades de transição entre níveis de energia. Em uma matriz densidade, estas probabilidades de transição são dadas pelos elementos fora de sua diagonal.

Colocando este fato em evidência frente ao resultado (1.0.11) percebemos uma inconsistência: dado um Hamiltoniano diagonal, a matriz densidade  $\rho$  de equilíbrio deste sistema também o é. Desta forma, os efeitos quânticos de correlação foram perdidos durante a evolução temporal deste sistema.

Desde a segunda metade do século passado, diversos autores dedicaram seus estudos a este efeito de perda de correlação quântica [9, 10]. Os métodos desenvolvidos são baseados,

em geral, em modificações estocásticas da equação de Schrödinger em uma aproximação Markoviana.

Uma das primeiras abordagens fora proposta por Kossakowski e Lindblad. Supondo que o reservatório de energia já se encontra em um estado de equilíbrio no princípio da dinâmica, dada uma certa temperatura, ele induz um certo estado de equilíbrio ao sistema com o qual entra em contato. A equação de Lindblad é definida como:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [H_A, \rho_A] + \gamma \sum_j \left( L_j \rho_A L_j^\dagger - \frac{1}{2} \{ L_j^\dagger L_j, \rho_A \} \right). \quad (1.0.12)$$

Como podemos observar, a equação (1.0.12) é bastante semelhante a equação de Schrödinger para matrizes densidade. Entretanto temos um termo extra que insere assimetrias no sistema A, onde  $L_j$  é um operador linear de mistura entre o sistema A e o reservatório, este último geralmente formado por uma superposição de bósons.

Uma dedução formal – usando-se da teoria de semigrupos quânticos dinâmicos – da equação de Lindblad pode ser encontrada em [17]. Em [18] encontramos uma dedução simplificada desta equação. Embora esta última não seja geral, os pré-requisitos são conhecimentos básicos de álgebra de operadores e matrizes densidade.

Embora a equação de Lindblad-Kossakowski seja a mais conhecida, neste trabalho utilizamos o conceito de sistemas quânticos abertos (*Open Quantum Systems*) [9]. Considere-se um sistema quântico aberto qualquer sistema que interage com outro externo, neste caso um reservatório de energia. O conceito de sistemas abertos baseia-se no fato de que qualquer sistema observável esta contido em um outro maior fechado, em último caso o universo (supondo este fechado).

Esta escolha foi feita em função do trabalho proposto por Gemmer, Michel e Mahler. Em [19], estes autores propõe um método de termalização para sistemas quânticos com poucos níveis. A princípio, este método pode ser aplicado a sistemas tão grandes quanto necessário, entretanto recaímos no mesmo problema partilhado pela hipótese apresentada no início deste capítulo.

Embora este trabalho seja original em alguns aspectos, como o conceito de temperatura espectral, alguns pontos importantes relacionados ao surgimento de uma distribuição de probabilidades clássica em um sistema quântico são desprezados. Uma vez que o fenômeno de decoerência é desprezado, não podemos afirmar que a temperatura espectral é um candidato ao posto de temperatura no universo quântico.

Desta forma, este trabalho tem por objetivo analisar alguns dos pontos remanescentes ao trabalho proposto por Gemmer e colegas. Entre estes, inserimos o conceito de decoerência quântica a partir de um ensemble de matrizes de interação. A fim de determinar o grau de decoerência, propomos um parâmetro que mede o quão quântico um sistema ainda é. Este parâmetro é, de modo geral, melhor do que os até então propostos, uma vez que este analisa a matriz densidade como um todo e não apenas termos isolados desta.

Outro ponto de interesse neste trabalho está associado a estrutura de níveis e res-

sonâncias de um sistema e seu respectivo reservatório de energia. Mostramos que nem todos os casos de ressonância geram como resultado uma distribuição de probabilidades de equilíbrio do tipo Boltzmann.

Por fim, analisamos alguns pontos importantes da dinâmica de um sistema quântico assim como efeitos locais de termalização.

No capítulo 2 descrevemos algumas ferramentas matemáticas que utilizamos no estudo da dinâmica destes sistemas de baixa dimensionalidade. Em suma, propomos um método onde dois sistemas puramente quânticos são postos em contato e evoluem para uma distribuição de probabilidades clássica.

No capítulo 3 descrevemos algumas características que o reservatório deve apresentar a fim de obtermos um estado estacionário ditado por uma distribuição de Boltzmann. Estas propriedades estão, sobretudo, ligadas à degenerescência de cada nível do reservatório.

No capítulo 4 analisamos o fenômeno de decoerência, isto é, o processo de perda das correlações entre os diversos níveis de energia do sistema em estudo. De modo geral, denominamos este tipo de correlação por *correlação quântica* neste trabalho.

Nos capítulos 6 e 7 estudamos alguns sistemas simples. Primeiro um sistema de 3 níveis não degenerados. Depois analisamos um sistema de spins com e sem interação, onde mostramos o efeito de termalização sobre cada componente de uma cadeia de spins.

# Capítulo 2

## Ferramentas Teóricas

Tomando como base teórica a Mecânica Estatística Quântica, sabemos como calcular os valores de ocupação de equilíbrio de qualquer sistema. Pode ser uma missão um tanto quanto árdua, mas a teoria é bastante direta, bastando diagonalizar o Hamiltoniano de um certo sistema e calcular sua função de partição.

Existem algumas técnicas para avaliar a evolução temporal de sistemas quânticos. Um destes métodos é utilizando a versão quântica equivalente a equação de Schrödinger (1.0.5) para matrizes densidade, também conhecida com o Equação de Liouville Quântica[4, 15]. Este método é provavelmente o mais conhecido, mas é bastante demorado do ponto de vista numérico.

Como já discutido, o formalismo vetorial implícito na equação de Schrödinger é praticável apenas para sistemas puros, isto é, não prevê efeitos de decoerência. Por esta razão, se queremos analisar efeitos de perda de correlação em um sistema acoplado a um reservatório de energia, o formalismo perde sua relevância. Por outro lado, o sistema completo (sistema em consideração mais reservatório) é fechado e, portanto, puro para qualquer intervalo de tempo. Desta forma, podemos considerar

$$H_T = H_A \otimes \mathbb{1}_R + \mathbb{1}_A \otimes H_R + V, \quad (2.0.1)$$

onde  $H_A$  e  $H_R$  são os Hamiltonianos do sistema considerado (A) e do reservatório (R), respectivamente.  $\mathbb{1}_m$  é o operador identidade com dimensão compatível ao número de níveis do sistema, “m”.  $V$  é uma matriz aleatória com valores consistentes com uma distribuição gaussiana<sup>1</sup>. Tratando o sistema completo como na equação (2.0.1), nos certificamos de que a evolução temporal ainda é àquela de um sistema quântico puro. Neste sentido, a equação de Schrödinger<sup>2</sup> ainda se aplica.

---

<sup>1</sup>De modo geral, poderíamos usar qualquer distribuição de números aleatórios com variância definida. Escolhemos a distribuição gaussiana, pois é a mesma utilizada por Gemmer.

<sup>2</sup>Daqui para frente, sempre que citarmos a equação de Schrödinger, estamos nos referindo à versão vetorial.

Suponhamos as seguintes relações

$$H_A |k\rangle = E_k |k\rangle \qquad H_R |\alpha\rangle = \epsilon_\alpha |\alpha\rangle \qquad (2.0.2)$$

onde  $|k\rangle$ ,  $|\alpha\rangle$ ,  $E_k$  e  $\epsilon_\alpha$  são os autovetores e autovalores do sistema A e do reservatório, respectivamente.

Seguindo a ordem dos produtos de Kronecker na equação (2.0.1), podemos construir um conjunto completo de vetores ortonormais do tipo  $|k\rangle \otimes |\alpha\rangle$  [3]. Aplicando estes autovetores no sistema ainda sem interação obtemos:

$$(H_A \otimes \mathbb{1}_R + \mathbb{1}_A \otimes H_R) |k\rangle \otimes |\alpha\rangle = (E_k + \epsilon_\alpha) |k\rangle \otimes |\alpha\rangle. \qquad (2.0.3)$$

Em outras palavras,  $|k\rangle \otimes |\alpha\rangle$  são os autovetores criados a partir da soma de sistemas distintos e não interagentes com respectivas energias  $E_{k\alpha} = E_k + \epsilon_\alpha$ . Usando este conjunto como base, construímos uma superposição destes autovetores:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{k,\alpha} c_{k\alpha}(t) |k\rangle \otimes |\alpha\rangle. \qquad (2.0.4)$$

A fim de se calcular a evolução temporal dos coeficientes  $c_{k\alpha}(t)$ , precisamos obter uma equação de Schrödinger para cada um deles.

$$\sum_{k,\alpha} i\hbar \partial_t c_{k\alpha}(t) |k\rangle \otimes |\alpha\rangle = \sum_{k,\alpha} c_{k\alpha}(t) (E_{k\alpha} + V) |k\rangle \otimes |\alpha\rangle \qquad (2.0.5)$$

Aplicando  $(|k\rangle \otimes |\alpha\rangle)^\dagger = \langle k| \otimes \langle \alpha|$  em ambos lados:

$$i\hbar \partial_t c_{l\beta}(t) = E_{l\beta} c_{l\beta}(t) + \sum_{k,\alpha} c_{k\alpha}(t) \langle l| \otimes \langle \beta| V |k\rangle \otimes |\alpha\rangle. \qquad (2.0.6)$$

Como exemplo, podemos analisar o caso onde  $V = 0$ , ou seja, sistemas não interagentes.

$$i\hbar \partial_t c_{l\beta}(t) = E_{l\beta} c_{l\beta}(t) = (E_l + \epsilon_\beta) c_{l\beta}(t) \qquad (2.0.7)$$

A solução para esta equação é simplesmente dada por:

$$c_{l\beta}(t) = c_{l\beta}^0 e^{\frac{E_l + \epsilon_\beta}{i\hbar} t}, \qquad (2.0.8)$$

que é a solução da equação de Schrödinger para os sistemas A e R individualmente. Tomando  $c_{l\beta}^0 = a_l^0 \gamma_\beta^0$ , poderíamos ter escrito a superposição (2.0.4) simplesmente como:

$$|\Psi(t)\rangle = \left( \sum_k a_k^0 e^{\frac{E_k}{i\hbar} t} |k\rangle \right) \otimes \left( \sum_\alpha \gamma_\alpha^0 e^{\frac{\epsilon_\alpha}{i\hbar} t} |\alpha\rangle \right). \qquad (2.0.9)$$

Neste ponto devemos refletir o significado deste resultado e porquê estamos seguindo

este caminho. Dada a escolha da base  $|k\rangle \otimes |\alpha\rangle$ , estamos assumindo que a matriz densidade calculada a partir destes autovetores se aplica à soma dos sistemas, isto é, estamos analisando os efeitos do Hamiltoniano  $V$  sobre o sistema não interagente  $H_A + H_R$ . Procedendo desta forma, podemos usar a ortonormalidade destes autovetores para isolar as matrizes densidade dos sistemas A e R – agora denominadas matrizes reduzidas – e analisar os efeitos da mesclagem introduzida pelo Hamiltoniano de interação  $V$ .

Nas próximas seções, trabalhamos em cima da solução de (2.0.6). Primeiro calculamos um operador que ditará a evolução temporal do sistema completo. Depois analisamos uma abordagem perturbativa, de modo a entender um pouco melhor como é dado o fluxo de energia do sistema A para o reservatório e vice-versa. Por último, mas não menos importante, estudamos o conceito de matriz densidade reduzida.

## 2.1 Operador de evolução temporal

Por simplicidade de notação e principalmente para fácil visualização, façamos o mapeamento de alguns índices. Observando a ordem dos produtos de Kronecker na equação (2.0.4), propomos um simples mapeamento:

$$c_{k\alpha} \rightarrow c_a = c_{k \times N_R + \alpha} \qquad E_k + \epsilon_\alpha \rightarrow E_a = E_{k \times N_R + \alpha}, \quad (2.1.1)$$

onde  $N_R$  representa o tamanho do reservatório.  $k$  está contido no intervalo  $[0, N_A)$  e  $\alpha$  em  $[0, N_R)$ . Seguindo a mesma ideia, podemos reescrever a projeção da matriz interação como

$$W_{ab} = W_{\substack{l \times N_R + \beta \\ k \times N_R + \alpha}} = \langle l | \otimes \langle \beta | V | k \rangle \otimes |\alpha\rangle. \quad (2.1.2)$$

Com esta nova notação, a equação de Schrödinger (2.0.6) assume a forma

$$i\hbar \partial_t c_a(t) = E_a c_a(t) + \sum_b W_{ab} c_b(t). \quad (2.1.3)$$

Para fins de construção de um operador de evolução temporal, podemos primeiro colocar esta equação em uma notação vetorial. Definindo uma nova matriz  $H_D; ab = E_a \delta_{ab} + W_{ab}$ , temos

$$i\hbar \partial_t \vec{c}(t) = H_D \vec{c}(t), \quad (2.1.4)$$

o que é exatamente o que precisamos para a construção do operador. Assumindo  $\vec{c}(t) = U(t)\vec{c}_0$ , podemos escrever uma equação de Schrödinger para  $U(t)$ . Como, por definição estamos trabalhando com Hamiltonianos não dependentes do tempo, é fácil mostrar que:

$$\vec{c}(t) = e^{\frac{H_D}{i\hbar} t} \vec{c}_0. \quad (2.1.5)$$

Como  $H_D$  não é diagonal devido a presença de uma matriz de interação, o cálculo de sua exponencial pode ser complicado. Por outro lado,  $H_D$  é uma matriz hermitiana, o que a implica em ser diagonalizável. Como demonstrado no apêndice A, tomando  $D = \Lambda H_D \Lambda^\dagger$ , onde  $\Lambda$  é a matriz dos autovetores de  $H_D$ ,  $D$  é uma matriz diagonal com autovalores  $\lambda_m$ , com  $m$  contido em  $[0, N_A N_R)$ . Assim,

$$U(t) = \Lambda \begin{bmatrix} e^{\frac{\lambda_0}{i\hbar} t} & & 0 \\ & e^{\frac{\lambda_1}{i\hbar} t} & \\ 0 & & \ddots \end{bmatrix} \Lambda^\dagger, \quad (2.1.6)$$

o que é bastante simples de resolver.

## 2.2 Resposta Linear

Embora a solução proposta na última seção seja exata, ela não nos devolve muita informação sobre a relaxação do sistema acoplado. Neste capítulo, desenvolvemos um método perturbativo capaz de nos fornecer informações sobre a corrente ou fluxo de probabilidade de um sistema ao relaxar.

Como estamos falando de Termodinâmica Quântica, a estrutura do sistema completo deve ser preservada durante a mistura. Para que isto ocorra, a matriz de interação deve ser fraca, ou seja, as autoenergias do sistema completo devem permanecer praticamente inalteradas frente ao efeito do Hamiltoniano de interação. Dedicaremos mais espaço para análise da matriz de interação no capítulo 4.

Antes de realizarmos as aproximações, podemos substituir

$$c_{l\beta}(t) = b_{l\beta}(t) e^{\frac{E_{l\beta}}{i\hbar} t}, \quad (2.2.1)$$

ou seja,  $c_{l\beta}(t)$  é dado pela função não perturbada da equação de Schrödinger temporalmente modulada por  $b_{l\beta}(t)$ . Se pode fazer um paralelo ao teorema de Bloch de Estado Sólido [20]. Enquanto Bloch impõe uma modulação espacial devido a interação com a rede, aqui temos uma modulação temporal devido ao fluxo de energia durante o processo de relaxação.

Substituindo (2.2.1) em (2.0.6), obtemos

$$i\hbar \partial_t b_{l\beta}(t) = \sum_{k,\alpha} e^{i\omega_{k\alpha}^{l\beta} t} V_{k\alpha}^{l\beta} b_{k\alpha}(t), \quad (2.2.2)$$

onde

$$\omega_{k\alpha}^{l\beta} = \frac{E_{l\beta} - E_{k\alpha}}{\hbar} \quad V_{k\alpha}^{l\beta} = \langle l | \otimes \langle \beta | V | k \rangle \otimes | \alpha \rangle. \quad (2.2.3)$$

Os cálculos feitos até aqui têm caráter exato. De agora em diante, introduzimos o



método perturbativo. Expandindo  $b_{l\beta}$ , temos

$$b_{l\beta}(t) = b_{l\beta}^0(t) + \eta b_{l\beta}^1(t) + \eta^2 b_{l\beta}^2(t) + \dots, \quad (2.2.4)$$

onde  $b_{l\beta}^m(t)$  com  $m \geq 1$  são correções ao coeficiente não perturbado  $b_{l\beta}^0$  e  $\eta$  é uma variável de controle da intensidade de cada contribuição dadas as respectivas correções. Como último passo, tomamos  $\eta = 1$ .

Substituindo a expansão (2.2.4) em (2.2.2) e separando de acordo com a magnitude de cada termo temos

$$\partial_t b_{l\beta}^0(t) = 0 \quad (2.2.5)$$

$$\partial_t b_{l\beta}^1(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_{k,\alpha} V_{k\alpha}^{l\beta} b_{k\alpha}^0 e^{i\omega_{k\alpha}^{l\beta} t} \quad (2.2.6)$$

$$\vdots \quad (2.2.7)$$

Como esperado, o primeiro termo da expansão (2.2.4) é simplesmente a solução não perturbada. A primeira correção pode ser calculada através de

$$b_{l\beta}^1(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_{k,\alpha} V_{k\alpha}^{l\beta} b_{k\alpha}^0 \frac{\sin\left(\frac{\omega_{k\alpha}^{l\beta} t}{2}\right)}{\omega_{k\alpha}^{l\beta}/2}, \quad (2.2.8)$$

onde é fácil mostrar que<sup>3</sup>

$$\lim_{\omega_{k\alpha}^{l\beta} \rightarrow 0} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{k\alpha}^{l\beta} t}{2}\right)}{\omega_{k\alpha}^{l\beta}/2} = t. \quad (2.2.9)$$

Ainda podemos calcular a probabilidade de transição entre níveis dentro deste sistema. Por definição, temos que a probabilidade de transição é dada por

$$P_{\rightarrow l\beta}(t) = |b_{l\beta}^1(t) + b_{l\beta}^2(t) + \dots|^2. \quad (2.2.10)$$

Como estamos interessados em uma primeira aproximação apenas, tomamos  $P_{\rightarrow l\beta}(t) = |b_{l\beta}^1(t)|^2$ . Desta forma, podemos escrever

$$P_{\rightarrow l\beta}(t) \sim \frac{1}{\hbar^2} \sum_{k,\alpha,m,\gamma} V_{k\alpha}^{l\beta} V_{l\beta}^{m\gamma} \rho_{m\gamma}^{k\alpha}(0) e^{i\frac{\omega_{k\alpha}^{l\beta}}{2} t} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{k\alpha}^{l\beta} t}{2}\right)}{\omega_{k\alpha}^{l\beta}/2} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{m\gamma}^{l\beta} t}{2}\right)}{\omega_{m\gamma}^{l\beta}/2}. \quad (2.2.11)$$

Por conseguinte, temos que a probabilidade de transição de um nível  $k\alpha$  qualquer para um nível arbitrário  $l\beta$  é dada por

---

<sup>3</sup>Basta expandir  $\sin\left(\frac{\omega_{k\alpha}^{l\beta} t}{2}\right)$  em série de Taylor.

$$P_{k\alpha \rightarrow l\beta}(t) \sim \frac{\rho_{k\alpha}^{k\alpha}(0)}{\hbar^2} |V_{k\alpha}^{l\beta}|^2 \left( \frac{\sin\left(\frac{\omega_{k\alpha}^{l\beta} t}{2}\right)}{\omega_{k\alpha}^{l\beta}/2} \right)^2. \quad (2.2.12)$$

Analisando esta última equação, vemos como o fluxo de probabilidade é dado em um sistema acoplado. O fluxo de probabilidade de ocupação entre níveis de mesma energia é dado com uma intensidade superior a dos níveis com energias diferentes, em outras palavras, observamos ressonâncias. Ou seja, a estrutura dos níveis energéticos dos sistemas a interagir precisa ser tal que permite o aparecimento de ressonâncias entre estes.

Por outro lado, o aparecimento de ressonâncias não é suficiente para o surgimento de uma distribuição de equilíbrio do tipo Boltzmann, como observaremos no capítulo 6. Como classicamente – Termodinâmica e Mecânica Estatística – esperamos que o reservatório imponha uma certa temperatura em algum sistema, devemos esperar que ele apresente uma estrutura de níveis necessária para termalização, isto é, para fins de observar os efeitos de ressonância e de reproduzir uma distribuição de equilíbrio Boltzmann no sistema a ele acoplado.

## 2.3 Matriz densidade Reduzida

Usando o formalismo vetorial implícito na equação de Schrödinger, pudemos calcular um operador para avaliar a evolução temporal do sistema como um todo. Este método é possível dado que o sistema completo se comporta como um sistema quântico puro, mesmo que composto por sistemas com entropia finita.

Naquele ponto, descrevemos os autovetores do sistema completo como produtos externos (produtos de Kronecker) dos autovetores de cada sistema constituinte. A razão desta escolha se dá pelo interesse sobre a evolução individual de cada sistema constituinte.

Por razões práticas, sempre assumimos que tanto o sistema A quanto o reservatório R eram sistemas puros antes de começarem a interagir. Neste momento inicial temos:

$$|\Psi(t)\rangle = \left( \sum_k a_k^0 e^{\frac{E_k}{\hbar}t} |k\rangle \right) \otimes \left( \sum_\alpha \gamma_\alpha^0 e^{\frac{\epsilon_\alpha}{\hbar}t} |\alpha\rangle \right). \quad (2.3.1)$$

Depois que a interação é “ligada”, o processo de mistura começa e os coeficientes desta expansão não podem mais ser separados de forma simples. Por este motivo, passa a ser necessário o uso do conceito de matriz densidade (reduzida) [15].

Começamos pela definição da matriz densidade do sistema completo. Dado o estado:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{k,\alpha} c_{k\alpha}(t) |k\rangle \otimes |\alpha\rangle, \quad (2.3.2)$$

a matriz densidade é definida como

$$\rho = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| = \sum_{k,l,\alpha,\beta} c_{k\alpha}(t) c_{l\beta}^*(t) |k\rangle \otimes |\alpha\rangle \langle l| \otimes \langle \beta|. \quad (2.3.3)$$

Mesmo sistemas acoplados apresentam matriz densidade normalizada, ou seja, com  $Tr(\rho) = 1$ . Desta forma, precisamos determinar como calcular o traço de uma matriz densidade de sistemas acoplados. O cálculo do traço convencional de um sistema deste tipo é dado por

$$\begin{aligned} Tr(\rho) &= \sum_{w,\delta} \langle w| \otimes \langle \delta| \rho |w\rangle \otimes |\delta\rangle \\ &= \sum_{k,l,\alpha,\beta,w,\delta} c_{k\alpha}(t) c_{l\beta}^*(t) \langle w| \otimes \langle \delta| k\rangle \otimes |\alpha\rangle \langle l| \otimes \langle \beta| w\rangle \otimes |\delta\rangle \\ &= \sum_{k,l,\alpha,\beta,w,\delta} c_{k\alpha}(t) c_{l\beta}^*(t) \delta_{wk} \delta_{lw} \delta_{\delta\beta} \delta_{\delta\alpha} = \sum_{w,\delta} c_{w\delta}(t) c_{w\delta}^*(t) = 1. \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

Como exemplo, vamos analisar o caso  $V = 0$ , ou seja, um caso onde os sistemas não interagem. Neste caso, em particular:

$$Tr(\rho) = \sum_{w,\delta} c_{w\delta}(t) c_{w\delta}^*(t) = \sum_w a_w^0 a_w^{0*} \sum_\delta \gamma_\delta^0 \gamma_\delta^{0*} = 1. \quad (2.3.5)$$

Dado o presente método para cálculo do traço convencional de uma matriz densidade para um sistema acoplado, podemos projetar esta matriz densidade no espaço de cada sistema constituinte. O resultado desta projeção é denominada “matriz densidade reduzida”.

Uma vez que este procedimento é uma modificação do traço convencional, este método é comumente conhecido por “traço parcial” (trace out) do sistema A ou do reservatório. A matriz densidade do sistema A é calculada através do traço parcial nas variáveis do reservatório,

$$\begin{aligned} \rho_A &= \sum_{w,r,\delta} |w\rangle \langle w| \otimes \langle \delta| \rho |r\rangle \otimes |\delta\rangle \langle r| \\ &= \sum_{\substack{k,l,w,r \\ \alpha,\beta,\delta}} c_{k\alpha}(t) c_{l\beta}^*(t) \delta_{kw} \delta_{lr} \delta_{\delta\alpha} \delta_{\delta\beta} |w\rangle \langle r| \\ &= \sum_{k,l,\delta} c_{k\delta}(t) c_{l\delta}^*(t) |k\rangle \langle l|. \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

Usando o mesmo método para realizar o traço parcial do sistema A, obtemos  $\rho_R$ . Neste caso:

$$\rho_R = Tr_A(\rho) = \sum_{\alpha,\beta,k} c_{k\alpha}(t) c_{k\beta}^*(t) |\alpha\rangle \langle \beta|. \quad (2.3.7)$$

Como exemplo, usamos novamente o caso de sistemas não interagentes. Neste caso,

$$c_{k\alpha}(t) = a_k^0 \gamma_\alpha^0 e^{\frac{E_k + \epsilon_\alpha}{i\hbar} t}.$$

Assim, se procuramos calcular  $\rho_A$  fazemos:

$$\rho_A = \sum_{k,l,\delta} a_k^0 a_l^{0*} \gamma_\delta^0 \gamma_\delta^{0*} |k\rangle \langle l| = \sum_{\delta} \gamma_\delta^0 \gamma_\delta^{0*} \sum_{k,l} a_k^0 a_l^{0*} |k\rangle \langle l| = \sum_{k,l} a_k^0 a_l^{0*} |k\rangle \langle l|. \quad (2.3.8)$$

Utilizando o mesmo método, podemos calcular a projeção no espaço do reservatório.

## Capítulo 3

# Reservatório de energia

No capítulo anterior desenvolvemos alguns métodos para analisar a evolução temporal de sistemas acoplados individualmente. Para tal, expandimos a função de onda do sistema completo na base dos produtos de Kronecker dos autovetores de cada um de seus sistemas constituintes. Depois, a fim de obtermos a matriz densidade de cada um destes sistemas, fez-se necessário o conceito de traço parcial. Uma vez que obtemos estes resultados, ainda discutimos o efeito desta evolução do ponto de vista da entropia de von Neumann.

Para a Mecânica Estatística usual, o reservatório de energia é imenso – com infinitos níveis de energia tendendo para uma distribuição contínua – portanto, ele é considerado aproximadamente imutável, mantendo uma temperatura constante durante todo o processo de termalização. Assim sendo, do ponto de vista da Mecânica Estatística, seja qual for a condição inicial do sistema considerado, esta não é mais relevante uma vez que este sistema entre em contato térmico com o reservatório de energia.

Por outro lado, sistemas não precisam ser necessariamente infinitos<sup>1</sup> para que termalização ocorra. Podemos ter sistemas com poucos graus de liberdade que relaxam para um condição estacionária de equilíbrio térmico.

Trabalhando com sistemas finitos de spins, Shankar [21] mostrou que mesmo um sistema com poucos graus de liberdade pode apresentar comportamento termodinâmico. Em seu trabalho, Shankar mostrou que uma vez que o sistema se encontra em situação de equilíbrio, a magnetização média desta cadeia de spins é descrita pelos resultados da Termodinâmica.

A fim de reproduzir um comportamento de equilíbrio em sistemas de dimensão finita, vimos na seção 2.2 (teoria perturbativa) que um reservatório finito deve apresentar uma estrutura de níveis pré-determinada pelo sistema ao qual ele irá se acoplar. Sendo assim, teremos ressonâncias que levam este sistema a um estado estacionário de Boltzmann.

Outro ponto importante é o fato de o conjunto dos sistemas (sistema A mais reservatório) apresentar energia suficiente para a obtenção de um estado de equilíbrio do tipo Boltzmann. Com a quantização da escala de energia – níveis energéticos de cada sistema

---

<sup>1</sup>Um sistema físico clássico é obviamente finito, mas dado o gigantesco número de graus de liberdade associados a este, associamos um conceito abstrato *infinito* para simplificação matemática.

– o fluxo de energia ou a corrente de probabilidade destes sistemas passa a se comportar de forma diferente.

Do ponto de vista de ensemble canônico, o reservatório contém tanta energia quanto necessário para a termalização de um sistema acoplado a ele. No entanto, quando falando de sistemas de baixa dimensionalidade passamos a tratar de um universo totalmente distinto.

Supondo sistemas finitos, podemos nos deparar com uma situação onde ambos sistemas – sistema A mais reservatório – apresentam uma distribuição de Boltzmann, mas com temperaturas distintas. Ainda há casos onde apenas o sistema A irá apresentar uma distribuição de Boltzmann de equilíbrio.

Neste trabalho iremos manter o reservatório o mais simples possível e seguir a proposta de Gemmer [19], onde este é determinado a partir de um Hamiltoniano diagonal. Desta forma, temos que a informação de temperatura deste estar inserida no formato de degenerescências de energia.

Dada a inserção de degenerescências no reservatório, uma vez que este se apresenta em equilíbrio térmico, a probabilidade de mensuração de uma certa energia  $\epsilon_\alpha$  é dada por

$$\rho_\alpha = \frac{g_\alpha e^{-\beta\epsilon_\alpha}}{\sum_\gamma g_\gamma e^{-\beta\epsilon_\gamma}} = Z^{-1} g_\alpha e^{-\beta\epsilon_\alpha}, \quad (3.0.1)$$

onde  $g_\alpha$  é uma abreviação para  $g(\epsilon_\alpha)$ , o número de níveis do sistema com energia  $\epsilon_\alpha$ , e  $Z$  é a função de partição canônica do reservatório.

Tipicamente, a degenerescência de um certo nível energético cresce rapidamente com a quantidade níveis. Desta forma,  $g_\alpha e^{-\beta\epsilon_\alpha}$  deve passar por um valor máximo em  $\epsilon_\delta$ . Neste ponto temos

$$\left. \frac{\partial (g_\alpha e^{-\beta\epsilon_\alpha})}{\partial \epsilon_\alpha} \right|_{\epsilon_\delta} = 0, \quad (3.0.2)$$

onde mostra-se que

$$g_\alpha = g_0 e^{\beta\epsilon_\alpha}, \quad (3.0.3)$$

dado  $g_0$  a degenerescência de energia do estado fundamental.

Supondo que o sistema A e o reservatório de energia apresentam energia suficiente, observaremos um caso onde ambos sistemas apresentarão um distribuição de equilíbrio Boltzmann. Isso ocorre em resposta à combinação dos resultados (3.0.1) e (3.0.3). Como níveis com mesma energia devem apresentar mesma probabilidade de mensuração no equilíbrio e que níveis menos energéticos são mais prováveis, a probabilidade de equilíbrio deve ser a mesma para todos os níveis do reservatório, isto é, a temperatura do reservatório passa a ser infinita. Em decorrência disso, temos que o sistema A edve apresentar uma

temperatura compatível com a degenerescência do reservatório.

Por fim, analisamos outro fenômeno intrinsecamente quântico. Vamos supor um sistema semelhante ao reservatório apresentado acima, mas, desta vez, ele apresenta infinitos níveis de energia e um padrão de degenerescências não tão bem definido.

Como a troca de energia – ou fluxo de probabilidades de ocupação – ocorre a partir de ressonâncias entre os níveis do sistema A e deste novo reservatório, é possível que sistemas distintos, com estrutura de níveis diferentes, apresentem temperaturas de equilíbrio completamente diferentes ao interagirem com o mesmo reservatório. Isto ocorre, pois estes dois sistemas interagem com partes distintas do reservatório.

# Capítulo 4

## Decoerência Quântica

Uma vez que estudamos a dinâmica de relaxação de sistemas para uma distribuição de Boltzmann, o efeito de decoerência quântica, isto é, a perda de correlação entre níveis de energia na matriz densidade, passa a ser relevante. Em 2013, Langen [22] mostrou, experimentalmente, que mesmo sistemas quânticos de muitos corpos isolados estão sujeitos a decoerência quântica quando estes corpos passam a interagir.

Por outro lado, a equação de Schrödinger não prevê o fenômeno de decoerência em sistemas puramente quânticos. Vamos analisar, por exemplo, uma cadeia de spins paramagnética,

$$H_S = -h \sum_{k=1}^N \sigma_k^z, \quad (4.0.1)$$

onde  $h$  é um campo magnético externo ao sistema e  $\sigma_k^i$  é a projeção  $i$  das matrizes de Pauli do spin  $k$ . A fim de inserirmos interação entre estes spins, propomos uma interação do tipo Heisenberg-XYZ [23, 24] de primeiros vizinhos. Esta é dada por:

$$H_{XYZ} = J_x \sum_{k=2}^N \sigma_{k-1}^x \otimes \sigma_k^x + J_y \sum_{k=2}^N \sigma_{k-1}^y \otimes \sigma_k^y + J_z \sum_{k=2}^N \sigma_{k-1}^z \otimes \sigma_k^z. \quad (4.0.2)$$

Na figura (4.0.1) temos o resultado da simulação de uma cadeia de 6 spins com<sup>1</sup>  $h = 1.4737$  acoplados por  $J_x = 0.860$ ,  $J_y = 0.223$  e  $J_z = 0.698$ . Neste caso, temos calculada a matriz reduzida para o spin mais à esquerda do sistema.

Como podemos observar, as curvas de correlação flutuam, mas apresentam uma amplitude não desprezível por todo o intervalo de tempo. Desta forma, precisamos de um método diferente para analisar a perda de coerência quântica entre níveis.

Embora existam diferentes abordagens para reproduzir o efeito de Decoerência Quântica [9, 10], grande parte delas é dada por uma evolução estocástica do sistema. Por definição, um evolução estocástica é qualquer tipo processo que não pode ser descrito através de uma evolução determinística – mesmo que saibamos as condições iniciais deste

---

<sup>1</sup>Parâmetros escolhidos aleatoriamente.



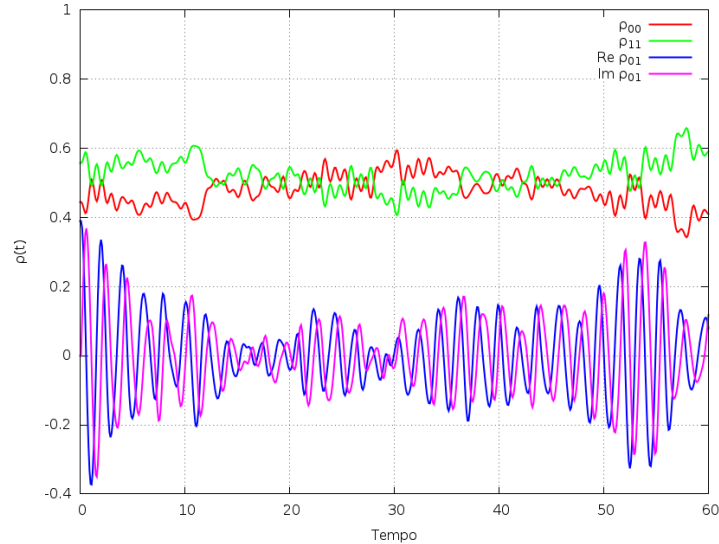


Figura 4.0.1: Elementos da matriz reduzida de um spin acoplado sob interação do tipo Heisenberg-XYZ. Em vermelho temos a probabilidade de ocupação do estado fundamental ( $-h$ ) e em verde do primeiro estado excitado ( $h$ ). Em azul e rosa, as curvas de correlação entre os dois níveis de energia.

– devido a efeitos aleatórios em sua dinâmica. No presente trabalho implementamos o uso de matrizes de interação aleatória com uma distribuição gaussiana.

A ideia por trás do uso de matrizes aleatórias em sistemas de baixa dimensionalidade se dá pela perda de controle sobre todas as possíveis interações sobre um sistema tão pequeno. Em outras palavras, não podemos afirmar com precisão o que de fato está interagindo ou não com o sistema em estudo.

Do ponto de vista experimental, mensurações feitas em tais sistemas são diretamente afetadas pelo tipo de interação favorecida até um certo instante de tempo. Por razões aleatórias intrinsecamente quânticas, esta interação pode ser alterada, resultando em flutuações. Desta forma, precisamos realizar diversas repetições de dado experimento a fim de observarmos algum comportamento mais relevante sobre este, ou seja, a observação de valores esperados.

Como estamos trabalhando com processos estocásticos, não podemos proceder de forma diferente, isto é, precisamos realizar diversas repetições e, a partir delas, obter médias. Usando matrizes densidade, temos

$$\rho(t) = \frac{1}{N} \sum_k \rho_k(t), \quad (4.0.3)$$

onde  $\rho_k(t)$  é matriz densidade calculada a partir de uma certa matriz de interação aleatória e a soma é sobre o número total de repetições realizadas.

Teoricamente, o ideal seria que todas essas médias fossem realizadas sobre um ensemble de infinitas repetições, mas isto não se configura como uma possibilidade do ponto de vista numérico, sobretudo pelo tempo de simulação. Como nosso objetivo principal é mostrar

que os sistemas termalizam, tomamos o ensemble tão grande quanto necessário para que o desvio padrão corrigido relativo médio dos elementos diagonais da matriz densidade reduzida do sistema no regime estacionário seja da ordem de  $10^{-3}$ . No apêndice C, fazemos uma análise detalhada de erro de ensemble e sua propagação no cálculo de valores esperados.

A próxima pergunta relevante para o método está na ordem de grandeza dos elementos desta interação aleatória. Tipicamente, quando falamos de interação num caráter termodinâmico, contato térmico entre um determinado sistema e um reservatório de energia, assumimos que esta é muito fraca, isto é, a intensidade dela é bastante inferior àquela apresentada pelo reservatório e pelo sistema acoplado. Esta suposição está no cerne da teoria termodinâmica, pois todos os resultados tradicionais usam esta suposição para análise dos mais diversos sistemas já estudados [1, 11, 12].

Do ponto de vista quântico, temos uma razão ainda mais clara para a suposição de interação fraca. Analisemos esta afirmação com auxílio de um exemplo. Tomando um sistema de 3 níveis com energias 0.5, 1.5 e 2.5 acoplado com um reservatório com energias 0.1, 1.1, 2.1 e 3.1, onde  $g(\epsilon_\alpha) = 2^{\alpha+1}$  e  $\alpha = 0, 1, 2$  e 3.

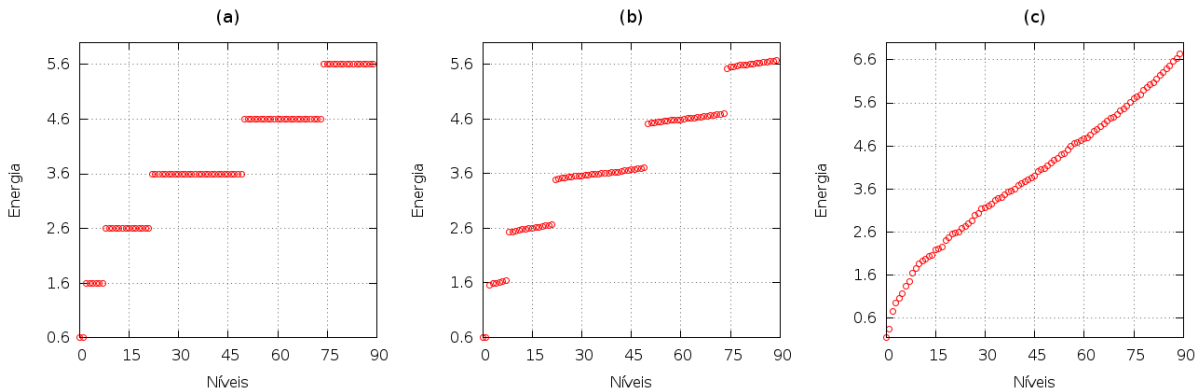


Figura 4.0.2: Relação entre intensidade da interação e a estrutura do sistema acoplado. Em (a) os sistemas acoplados não interagem, em (b) a interação é fraca e, em (c), da ordem de 10 vezes mais forte que em (b).

Na figura (4.0.2) temos a relação de energia dos sistemas acoplados e as modificações na estrutura deste geradas pela matriz de interação. Em (a), o sistema é não interagente, ou seja, não há troca de energia entre o sistema A e o reservatório. Em (b), inserimos uma matriz de interação com elementos da ordem de  $10^{-4}$ . Nota-se que embora a estrutura do sistema esteja levemente modificada, ela ainda é preservada. Em (c), fora imposta uma interação com elementos da ordem de  $10^{-3}$ . Neste ponto não reconhecemos mais os níveis de energia originais do sistema acoplado.

De modo geral, definimos

$$V = \frac{\kappa}{Tr(A^2)} A, \quad (4.0.4)$$

como a matriz de interação do sistema, onde  $A$  é uma matriz hermitiana da dimensão do

sistema acoplado e com elementos aleatórios gerados por uma distribuição gaussiana<sup>2</sup> e  $\kappa$  uma variável de controle. Para garantir que a matriz  $V$  de interação seja fraca, dividimos  $A$  por  $Tr(A^2)$ . Desta forma, não importa o desvio padrão e a média dos elementos desta distribuição, temos que os elementos finais serão pequenos.

Voltando ao exemplo anterior, na figura (4.0.3) demonstramos o histograma de níveis de energia para o caso de interesse (interação fraca). Dada a importância das repetições mencionadas, esta figura é o resultado de 10 mil simulações. Em (a) podemos observar o efeito de interação sobre o sistema acoplado. Os valores foram normalizados pelo número de repetições feitas. Em (b), os resultados perturbados em torno do nível 3.6 foram ampliados.

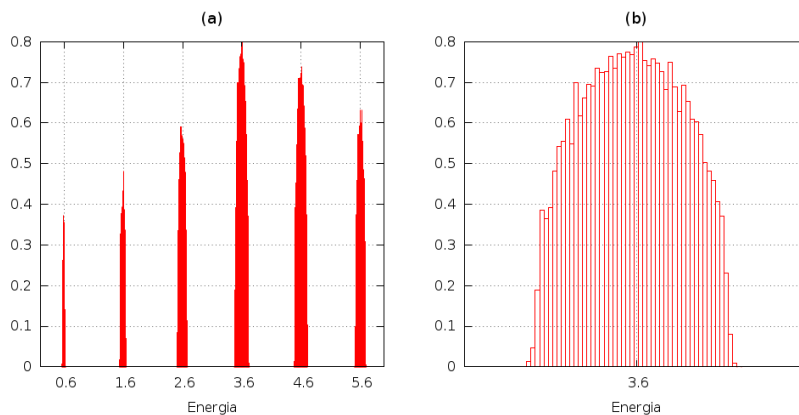


Figura 4.0.3: Distribuição dos níveis de energia perturbados por uma matriz de interação fraca. No limite de muitas repetições, as distribuições em torno de cada energia tendem para uma do tipo semi-círculo.

Analisando todos os pontos mencionados até então, juntamente com o resultado apresentado na figura (4.0.3), podemos associar o conceito de Decoerência Quântica ao teorema do Semi-Círculo [25]. Ou seja, quanto mais próximo de uma distribuição de semi-círculo estivermos dado um certo número de repetições, menor será a coerência quântica deste sistema em equilíbrio.

A fim de determinar como se dá a perda de correlação quântica de um sistema quântico, alguns métodos foram propostos. Em geral, a análise é feita a partir da evolução dos elementos fora da diagonal, onde escolhemos o maior destes elementos e acompanhamos a amplitude deste elemento no tempo.

Propomos neste trabalho um método semelhante, no sentido de acompanharmos a evolução dos elementos fora da diagonal da matriz densidade, mas diferente. Em lugar de acompanharmos a evolução de apenas um único elemento, acompanhamos todos eles ao mesmo tempo.

Dada a forma da distribuição de probabilidades de Boltzmann,

<sup>2</sup>Poderíamos ter escolhido qualquer tipo de distribuição aleatória com variância bem definida, entretanto, permanecemos com a escolha feita por Gemmer em [19].

$$\rho = Z^{-1} e^{-\beta H} \quad (4.0.5)$$

temos que ela é diagonal se  $H$  estiver em sua forma diagonal. Desta forma, a principal diferença entre um sistema em equilíbrio e um sistema fora de equilíbrio é a presença de elementos fora da diagonal. Por conseguinte, uma vez que o sistema entra em equilíbrio térmico, os autovalores de sua matriz densidade são idênticos aos elementos diagonais da matriz densidade.

Sendo assim, definimos o seguinte parâmetro de decoerência

$$\Upsilon^2 = \sum_k (\rho_k - \lambda_k)^2, \quad (4.0.6)$$

onde  $\lambda_k$  é o autovalor correspondente à probabilidade  $\rho_k$  de um certo estado. Desta forma, a medida que  $\Upsilon$  tende para zero, as correlações quânticas deste sistema tendem para zero. Em outras palavras, o sistema deixa de ser quântico e passa a se portar como um sistema clássico.

Na figura (4.0.4) temos o parâmetro  $\Upsilon^2$  para o sistema referente à figura (4.0.1). Como podemos observar, ele depende da amplitude das oscilações da parte real e imaginária do elemento não-diagonal deste spin.

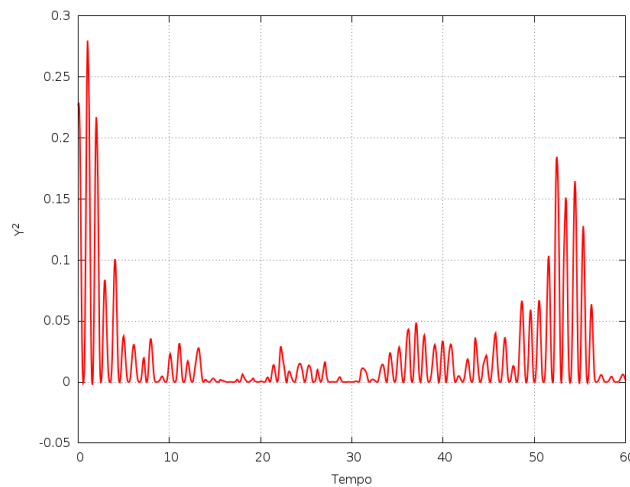


Figura 4.0.4: Evolução temporal do parâmetro  $\Upsilon^2$  para o spin do exemplo da figura (4.0.1). Como o sistema é puramente quântico, a amplitude de correlações de níveis é diferente de zero na maior parte do tempo.

# Capítulo 5

## Temperatura

Tradicionalmente, quando começamos a estudar Mecânica Estatística com sua teoria de ensemble microcanônico, partimos do pressuposto que todos os microestados com mesma energia interna devem ser igualmente prováveis. Esta conceito é comumente denominado como “probabilidades iguais a priori”. A partir desta suposição e do fato que a energia total neste ensemble é constante durante todo o processo de relação, chegamos a seguinte igualdade:

$$\frac{\partial \log(\Omega^A)}{\partial U^A} = \frac{\partial \log(\Omega^R)}{\partial U^R}, \quad (5.0.1)$$

onde  $\Omega^A$  e  $\Omega^R$  são, respectivamente, o número total de microestados acessíveis a estes sistemas com energias  $U^A$  e  $U^R$ . Empiricamente temos que dois sistemas estão em equilíbrio térmico quando ambos apresentam a mesma temperatura, desta forma, presumimos que  $\frac{\partial \log(\Omega^A)}{\partial U^A}$  é proporcional a temperatura destes sistemas.

Alguns anos depois destes resultados serem publicados por Boltzmann, Planck definiu o que comumente conhecemos como entropia de Boltzmann:

$$S = k_B \log(\Omega), \quad (5.0.2)$$

e, com esta definição, definiu-se temperatura:

$$\beta = \frac{1}{k_B T} = \frac{\partial S}{\partial U}. \quad (5.0.3)$$

No ensemble canônico, a temperatura não pode ser encarada de forma diferente devido ao princípio de equivalência entre ambos ensembles. Neste caso, temos que um sistema gigantesco – denominado reservatório térmico – está em contato térmico com um sistema menor. Uma vez que esta dinâmica atinge um ponto de equilíbrio, o sistema menor deve apresentar uma certa temperatura pré-determinada pelo reservatório térmico.

Não seguindo os procedimentos padrões, Gemmer lançou o conceito de Temperatura Espectral [19]. A ideia por trás desta proposta é definir uma “temperatura” que pudesse ser aplicada a sistemas quânticos, inclusive isolados. Por decorrência, esta definição também

seria válida para sistemas fora de equilíbrio térmico.

Embora esta proposta seja bastante interessante, ela só é realmente relevante a partir do momento em que o sistema se encontra em uma distribuição de Boltzmann. Isso acontece pelo simples fato de o sistema não evoluir de acordo com uma “sucessão de estados de equilíbrio”, como veremos no capítulo 6.

Supondo um Hamiltoniano diagonal qualquer, podemos escrever

$$\rho_i = \frac{g_i e^{-\beta E_i}}{\sum_k g_k e^{-\beta E_k}}. \quad (5.0.4)$$

De forma a isolar  $\beta$  sem termos que lidar com a função partição, podemos calcular  $\beta$  por pares de níveis. Sendo assim,

$$\beta (E_{k+1} - E_k) = \log \rho_k + \log g_{k+1} - \log \rho_{k+1} - \log g_k \quad (5.0.5)$$

Como a proposta fora feita para o estudo de sistemas quânticos pequenos, existem muitas flutuações das probabilidades de ocupação a medida que o sistema evolui no tempo. Além disso, o sistema não descreve uma sucessão de estados de equilíbrio, portanto precisamos realizar uma média sobre  $\beta$  calculado em todos os pares. Assumindo a normalização,

$$\sum_{k=0}^{N-1} \frac{\rho_k + \rho_{k+1}}{2} = 1 - \frac{\rho_0 + \rho_N}{2}, \quad (5.0.6)$$

temos definida uma equação para o cálculo da Temperatura Espectral:

$$\beta_s = \left(1 - \frac{\rho_0 + \rho_N}{2}\right)^{-1} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{\rho_k + \rho_{k+1}}{2} \frac{\log \rho_k + \log g_{k+1} - \log \rho_{k+1} - \log g_k}{E_{k+1} - E_k}. \quad (5.0.7)$$

Gemmer demonstrou que, embora esta definição de temperatura não seja compatível com a temperatura de Boltzmann/Gibbs numa região fora do equilíbrio, esta recai na definição tradicional uma vez que o sistema está termalizado. Por outro lado, ela nos fornece algumas informações importantes a respeito da dinâmica do sistema em estudo.

Podemos, por exemplo, obter alguma informação sobre em que tipo de superposição o sistema se encontra em algum instante de tempo. Como a temperatura espectral pode ser negativa, podemos determinar se o sistema se encontra em um estado de inversão de população, isto é, com níveis mais energéticos mais prováveis.

Como a temperatura espectral é calculada a partir da média de probabilidades de mensuração de certas energias, onde que estas energias podem, dependendo o sistema em estudo, ser compostas a partir da soma de subsistemas, por decorrência, a temperatura espectral é pode ser considerada uma média da temperatura de cda subsistema. Sendo assim, podemos encontrar casos onde a temperatura de cada subsistema pode ser diferente, mesmo que no equilíbrio.

No capítulo 7 iremos analisar um sistema de spins acoplado a um reservatório. Neste capítulo mostramos que a temperatura de equilíbrio de cada spin será diferente quando estes são interagentes.

# Capítulo 6

## Sistemas Diagonais

Até o presente momento descrevemos (capítulos 2-5) alguns pontos importantes da teoria como um todo. Primeiro desenvolvemos ferramentas matemáticas para a análise individual de cada sistema constituinte de um sistema maior, acoplado. Depois fizemos algumas considerações sobre a estrutura de níveis que o reservatório deve apresentar para termalizar um certo sistema a ele acoplado.

Neste trajeto, nos deparamos com o fenômeno de Decoerência Quântica, o esmaecimento das probabilidades de transição entre níveis de energia diferentes. Dado o histórico de implementação de processos estocásticos na termalização de sistemas quânticos, propomos que a matriz de interação deveria ser aleatória e fraca, onde o conceito de repetições/ensemble de matrizes aleatórias se fez importante. Neste ponto, fomos capazes de unir o conceito de Semicírculo – próprio da teoria de matrizes aleatórias – onde quanto mais próximos estivermos de uma distribuição de Semicírculo, menor o comportamento quântico deste sistema quando em equilíbrio, ou seja, menor a amplitude de correlação quântica deste sistema.

Por fim, mostramos uma nova abordagem para temperatura nestes sistemas – a Temperatura Espectral – definida por Gemmer [19]. Percebemos que esta definição só é realmente relevante a partir do momento em que este sistema se encontra em uma distribuição de equilíbrio do tipo Boltzmann. O argumento apresentado foi que um sistema quântico não possui uma dinâmica descrita por uma sucessão de estados de equilíbrio, conceito fundamental na Termodinâmica clássica.

Neste capítulo iremos analisar todos estes resultados discutidos com mais detalhe. Para tal, trabalhamos em cima de dois tipos de sistemas distintos. A diferença entre eles se dará pela presença ou não de degenerescência.

### 6.1 Sistemas não degenerados

Sempre que começamos a estudar uma nova teoria, procuramos os sistemas mais simples possíveis para, assim, entendermos alguns pontos mais fundamentais de seu desen-



volvimento. Desta forma, escolhamos um sistema semelhante a um oscilador harmônico, isto é, um sistema com um incremento fixo de energia entre níveis consecutivos, porém com um número finito de níveis.

Poderíamos escolher um sistema com apenas dois níveis, porém este é demasiadamente simples. Como existe uma equação de normalização, temos apenas um parâmetro de ocupação no sistema. Desta forma, este sistema é singular e, como veremos, é o único cuja dinâmica é sempre dada por uma sucessão de estados de equilíbrio termodinâmico.

Sendo assim, escolhamos um sistema com 3 níveis, com Hamiltoniano dado por

$$H_A = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & 0 \\ 0 & E_0 + \Delta & 0 \\ 0 & 0 & E_0 + 2\Delta \end{pmatrix}, \quad (6.1.1)$$

onde  $E_0$  é uma constante de ajuste da escala de energia (tomaremos  $E_0 = 0.5$  no exemplo) e  $\Delta$  uma constante de incremento de energia.

O reservatório terá 3 energias distintas e uma degenerescência compatível com  $\beta = \log 2$  e  $g_0 = 5$ , ou seja,  $g_\alpha = 5 \times 2^\alpha$ . Logo,

$$H_R = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & \cdots & 0 \\ \ddots & & \\ \vdots & \epsilon_0 + \Gamma & \vdots \\ 0 & \cdots & \epsilon_0 + 2\Gamma \end{pmatrix}, \quad (6.1.2)$$

onde  $\epsilon_0$  é para escala de energia (tomaremos  $\epsilon_0 = 0.1$  no exemplo) e  $\Gamma$  tem a mesma função de  $\Delta$ .

Como discutido no capítulo referente a resposta linear, uma vez que o sistema é acoplado e os níveis de energia do sistema completo são calculados, a equação de Schrödinger apresenta ressonância para níveis com mesma energia, ou seja, a corrente de probabilidade entre estes dois níveis é mais intensa. Desta forma, as possíveis combinações de  $\Delta$  e  $\Gamma$  são responsáveis pelo surgimento destas ressonâncias que maximizam o fluxo de probabilidade.

Uma vez que o fluxo de probabilidade é o responsável pela termalização do sistema considerado, precisamos de um parâmetro de medida do grau de termalização do sistema em função de  $\Delta$  e  $\Gamma$ , isto é, o quão próximo de uma distribuição de Boltzmann está a configuração de equilíbrio deste sistema. Definimos:

$$\Theta = \sum_k \left| \rho_k - \frac{e^{-\beta_s E_k}}{Z(\beta_s)} \right|, \quad (6.1.3)$$

onde  $|\cdot|$  refere-se ao valor absoluto,  $\rho_k$  ao elemento diagonal  $k$  da matriz densidade reduzida e  $\beta_s$  à temperatura espectral. Assim definido, quanto mais próximo de zero for

$\Theta$ , mais próximo de uma distribuição de Boltzmann o sistema deve estar.

Outro ponto importante está associado às condições iniciais do sistema e do reservatório. Estamos acostumados a lidar com um reservatório de energia em uma escala termodinâmica, ou seja, não importa o sistema a ele conectado nem a energia deste, o reservatório sempre é capaz de termalizar este sistema a ele acoplado. Da mesma forma, nunca nos perguntamos em que tipo de superposição o reservatório se encontra uma vez que o sistema se encontra em regime estacionário.

Por outro lado, a medida que o número de graus de liberdade do sistema e do reservatório diminuem, precisamos levar em consideração este efeito de baixa dimensionalidade. Como o reservatório de energia não é mais infinito, a quantidade de energia a ele associada passa a ser importante. Entretanto, isto não é empecilho para a não obtenção de uma superposição de equilíbrio do tipo Boltzmann.

Em 1985, Shankar [21] mostrou que mesmo um sistema de poucos spins pode apresentar valores de magnetização correspondentes aos resultados da Mecânica Estatística convencional, onde o reservatório é infinito. Desta forma, ressaltamos a importância das condições iniciais tanto do sistema quanto do reservatório ao qual ele se acopla [26].

Neste exemplo supomos que toda a energia do sistema está no reservatório. Consequentemente, o sistema de 3 níveis está em seu estado fundamental em  $t = 0$ , enquanto o reservatório está em uma combinação aleatória do seu segundo estado excitado.

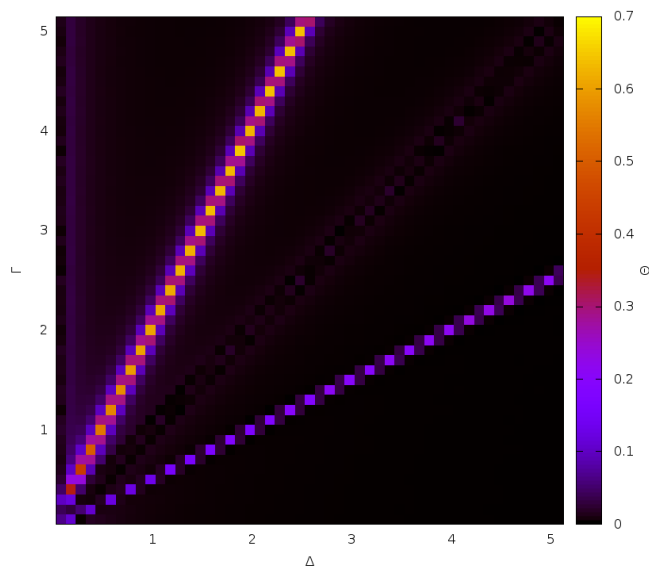


Figura 6.1.1: Diagrama  $\Delta \times \Gamma$  de energia para o sistema de 3 estados a partir do estado fundamental. Em cores o parâmetro  $\Theta$ .

Na figura (6.1.1) apresentamos o diagrama de termalização para este sistema, inicialmente no estado fundamental. Analisando este diagrama observamos que a configuração de equilíbrio do sistema pode ser bem aproximada por uma distribuição do tipo Boltzmann

na maior parte dos casos.

Entretanto, esta análise deve ser realizada com cuidado. Uma vez que o sistema está em seu estado fundamental em  $t = 0$ , este estado equivale a uma distribuição de Boltzmann para  $T = 0$ . Desta forma, um sistema que não interage também apresenta uma distribuição de Boltzmann.

Por outro lado, este diagrama apresenta dois resultados não triviais. Existem ressonâncias presentes em  $\Gamma = 2\Delta$  e  $\Gamma = \frac{\Delta}{2}$ . Na figura (6.1.2) temos um esquema de comparação entre estes casos de ressonância do reservatório (vermelho e azul) com o sistema(verde).

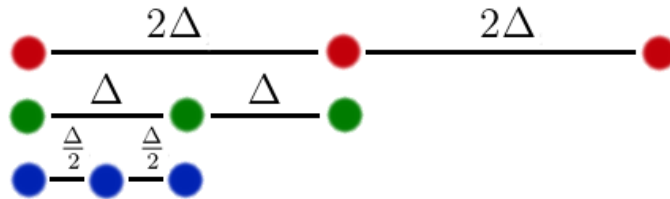


Figura 6.1.2: Esquema de ressonâncias entre o reservatório e o sistema não degenerado para  $\Gamma = 2\Delta$ ,  $\Gamma = \Delta$  e  $\Gamma = \frac{\Delta}{2}$ .

Dadas as condições iniciais impostas, no vermelho as ressonâncias ocorrem entre o estado fundamental e o segundo estado excitado do sistema. Isto é, não haverá fluxo de probabilidade no primeiro estado excitado. Em azul, o fluxo de probabilidade ocorre apenas entre o estado fundamental e primeiro excitado.

A figura (6.1.2) evidencia o porquê da diferença de valores entre as funções  $\Gamma = 2\Delta$  e  $\Gamma = \frac{\Delta}{2}$ . A situação em vermelho implica em um inversão de população, o que não confere com o padrão de uma distribuição de Boltzmann.

A fim de compreendermos o significado do parâmetro  $\Theta$  utilizado e o que termalizar significa do ponto de vista da temperatura espectral e entropia de von Neumann, vamos analisar alguns pontos especiais do diagrama (6.1.1). Dadas as funções  $\Gamma = 2\Delta$ ,  $\Gamma = \Delta$  e  $\Gamma = \frac{\Delta}{2}$ , escolhemos  $\Delta = \{0.7, 1.0, 1.6\}$ , respectivamente.

### Incrementos: $\Delta = 1.0$ e $\Gamma = 1.0$

Embora o método tradicionalmente usado seja, em suma, avaliar a evolução temporal de algum sistema quântico de interesse, este pode ser bastante demorado e caro do ponto de vista computacional. A figura (6.1.2) nos provêm alguma informação, de modo que podemos esperar/prever qual será o resultado de equilíbrio do sistema em consideração.

Propomos, porém, um método diferente. O propósito deste método é mapear todas as possíveis rotas de probabilidade dentro do sistema completo e, por conseguinte, determinar de antemão se determinado sistema acoplado irá termalizar ou não.

Na figura (6.1.3) temos o histograma do sistema sujeito à condição  $\Gamma = \Delta$  e uma imagem demonstrando como os níveis de energia do sistema total são construídos. Em busca de uma melhor visualização, alguns rótulos do reservatório foram suprimidos.

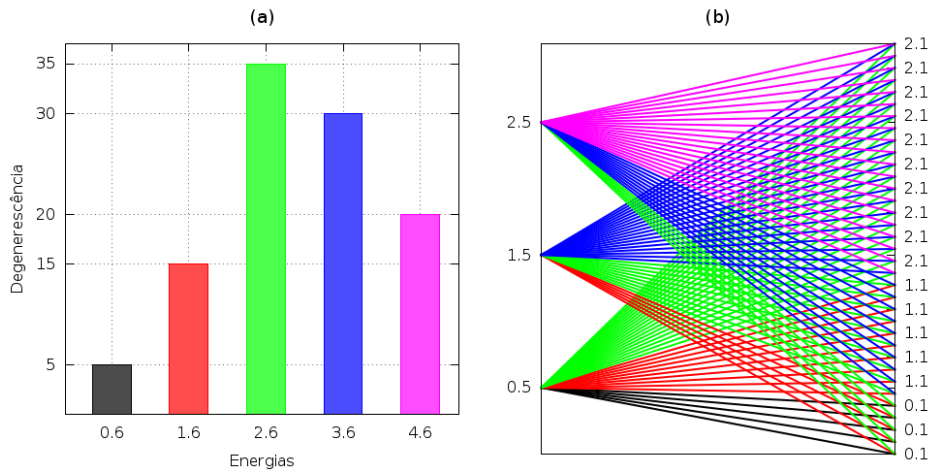


Figura 6.1.3: Histograma e gráfico de energias para um sistema de 3 níveis acoplado com um reservatório. Ambos sistemas apresentam o mesmo incremento de energia. Os picos no histograma são representados no gráfico com linhas de mesma cor.

A imagem mostra todas as possíveis conexões entre o sistema de 3 níveis e o reservatório de 35 níveis. O histograma mostra o número de conexões com determinada energia, onde a cada energia associamos uma cor diferente.

No capítulo referente a resposta linear, mostramos que o fluxo de probabilidade entre níveis com mesma energia é mais intenso do que aqueles com energias diferentes. Sendo assim, o fluxo de probabilidade entre linhas com mesma cor é mais intenso do que linhas com cores diferentes.

Como existe uma condição de normalização de probabilidades, a soma das probabilidades de todas as conexões (linhas) do grafo, em qualquer instante de tempo, deve ser igual a 1. Em  $t = 0$ , temos que os únicos níveis (linhas) com probabilidade diferente de zero são as linhas verdes entre 0.5 e 2.1.

O papel da matriz de interação é garantir que todos os níveis com mesma energia (cor) sejam equiprováveis uma vez que o sistema atinge seu regime estacionário, ou seja, todos os níveis com mesma energia apresentam a mesma probabilidade no equilíbrio. As linhas pretas, por exemplo, garantem que todos os níveis 0.1 do reservatório sejam equiprováveis no equilíbrio.

Entretanto, as conexões de maior importância para a dinâmica do sistema de 3 níveis são aquelas que provêm fluxo de probabilidade entre níveis de energias distintos deste sistema. Neste caso, temos que os níveis com energia 1.6 (linhas vermelhas) provêm a troca de probabilidades entre os níveis 0.5 e 1.5 do sistema. O mesmo é válido para as linhas azuis e os níveis 1.5 e 2.5.

Como a matriz de interação apresenta elementos com intensidade bastante fraca, temos que, em primeira aproximação, linhas vermelhas e azuis não poderiam trocar probabilidade. Este fator ressalta a importância das conexões verdes.

Dada a estrutura de níveis do reservatório, percebemos que qualquer um dos níveis de

energia do sistema de 3 níveis apresenta o dobro de conexões de mesma cor do que o seu sucessor. Analisando as linhas verdes, temos que o nível 0.5 do sistema tem 20 linhas, o nível 1.5 apresenta 10 linhas e o nível 2.5 apresenta 5 linhas.

Dada a condição de equiprobabilidade, esta simetria implica nas seguintes probabilidades de equilíbrio:  $\frac{20}{35}$ ,  $\frac{10}{35}$  e  $\frac{5}{35}$ , respectivamente. Estas probabilidades são as dadas pela distribuição de Boltzmann com  $\beta = \ln 2$ .

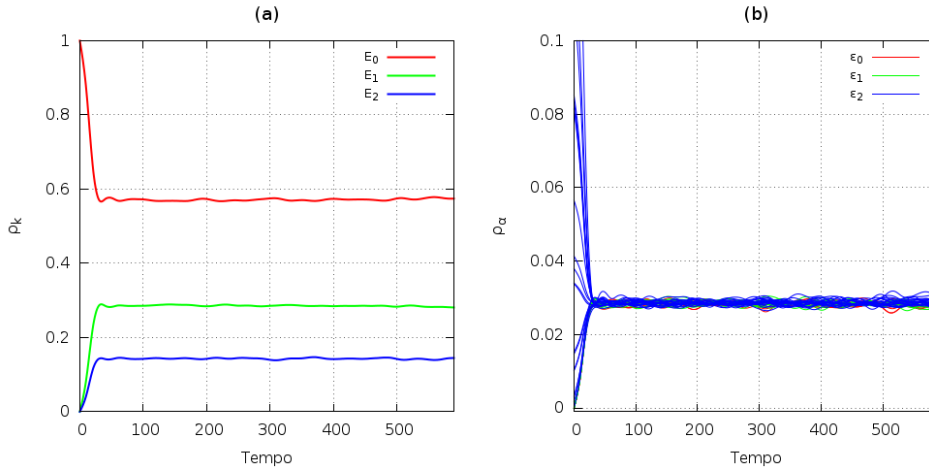


Figura 6.1.4: Evolução temporal de um sistema de 3 níveis acoplado com um reservatório de energia. A relação de incrementos de energia é dada por  $\Gamma = \Delta$ . Em (a), a evolução do sistema com 3 níveis. Em (b), do reservatório.

Na figura (6.1.4) temos a evolução temporal das probabilidades de cada nível de energia do sistema de 3 níveis e do reservatório. Pela mesma razão que o sistema de 3 níveis apresenta esta ocupação, o reservatório apresenta uma ocupação equiprobabilística. Isso ocorre em razão da degenerescência do reservatório.

Como a equação de Schrödinger para a evolução temporal fora resolvida analiticamente através de um operador de evolução temporal, temos que o eixo temporal é simplesmente dado por  $\frac{t}{\hbar}$ . A escala de tempo – o que é considerado um grande ou pequeno intervalo de tempo – está intrinsecamente relacionada a definição de matriz de interação entre o sistema A e o reservatório. Dada a definição feita, temos que quanto maior o sistema mais tempo este leva para atingir o regime estacionário. Como perspectiva, temos a averiguação de uma lei de escala temporal, conectando o tempo de perda de coerência quântica ao tamanho do sistema dada a definição de matriz de interação aleatória aqui utilizada.

Na figura (6.1.5) analisamos a evolução temporal de alguns parâmetros deste sistema composto. Como ambos sistemas são considerados puros em  $t = 0$ , temos que a entropia de von Neumann (a) parte de zero. Como obtemos uma ocupação equiprobabilística de todos os níveis do reservatório, temos que sua entropia é maximizada com  $\ln 35$ . Uma vez que a entropia do reservatório é máxima, temos que sua temperatura de equilíbrio tende para infinito.

A entropia de von Neumann do sistema de 3 níveis não é máxima, mas apresenta o

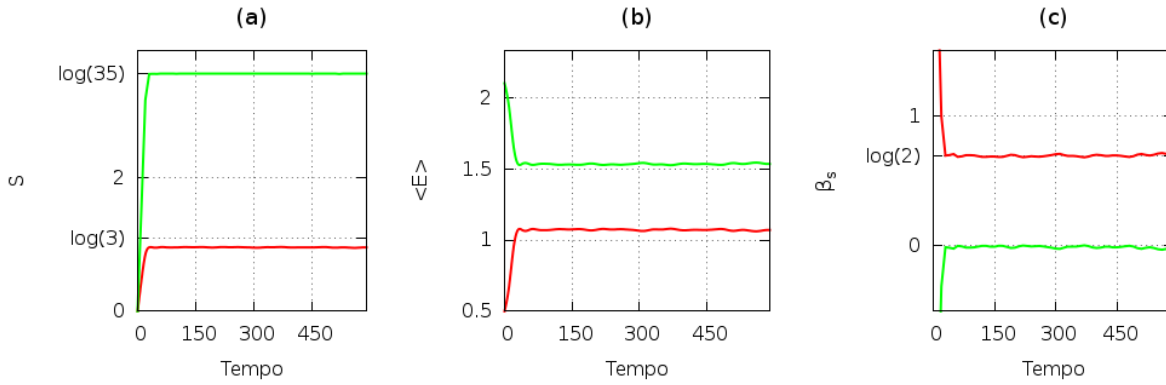


Figura 6.1.5: As curvas em verde referem-se ao reservatório e as vermelhas ao sistema de 3 níveis. Em (a), (b) e (c) temos a entropia de von Neumann, a energia média e  $\beta_s$ , respectivamente, dos dois sistemas.

resultado termodinâmico compatível com  $\beta = \ln 2$ . Em (b) podemos analisar como a troca de energia entre o sistema e o reservatório ocorreu.

**Incrementos:**  $\Delta = 0.7$  e  $\Gamma = 1.4$

Nesta situação temos um comportamento completamente diferente do anterior. Observando o histograma (6.1.6a) percebemos que houve uma quebra de simetria<sup>1</sup> neste sistema. Dada a análise realizada na figura (6.1.2), esperamos que o sistema de 3 níveis apresente um estado estacionário onde o segundo estado excitado é mais provável que o primeiro, o que implica em uma situação típica de inversão de população.

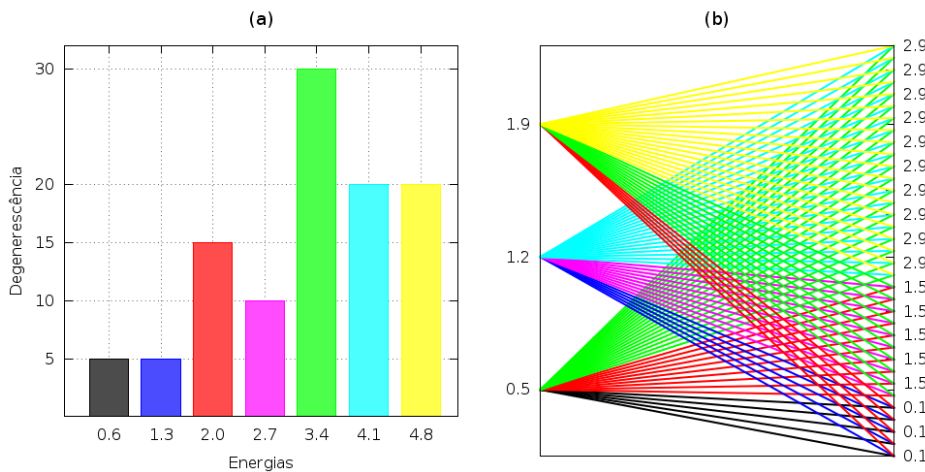


Figura 6.1.6: Em (a), histograma do sistema acoplado, mas ainda sem interação. Em (b), gráfico das energias correspondentes ao histograma. Cores iguais representam energias iguais.

Observando o grafo bipartido (6.1.6b) podemos determinar qual será a condição de

<sup>1</sup>Por quebra de simetria, me refiro ao fato de não existirem níveis com mesma energia/cor que proporcionem um fluxo de probabilidade de ocupação ressonante entre todos os níveis do sistema acoplado ao reservatório que culmine em um estado estacionário de Boltzmann.

equilíbrio deste sistema. Como antes, a soma da probabilidade de todas as linhas verdes que conectam o nível 0.5 do sistema aos níveis 2.9 do reservatório é igual a 1 em  $t = 0$ .

Em primeira aproximação, temos que o fluxo de probabilidade será dada principalmente pelas linhas verdes. Deste modo, temos que o nível 1.2 do sistema e os níveis 0.1 do reservatório estão ilhados e não trocam probabilidade com o restante dos níveis.

Dada a degenerescência do reservatório, temos que 0.5 apresenta o dobro de conexões verdes do nível 1.9, portanto será 2 vezes mais provável. Pela mesma razão, os níveis 1.5 e 2.9 do reservatório serão equiprováveis. Na figura (6.1.7), temos a evolução temporal dos elementos diagonais das matrizes reduzidas dos dois sistemas.

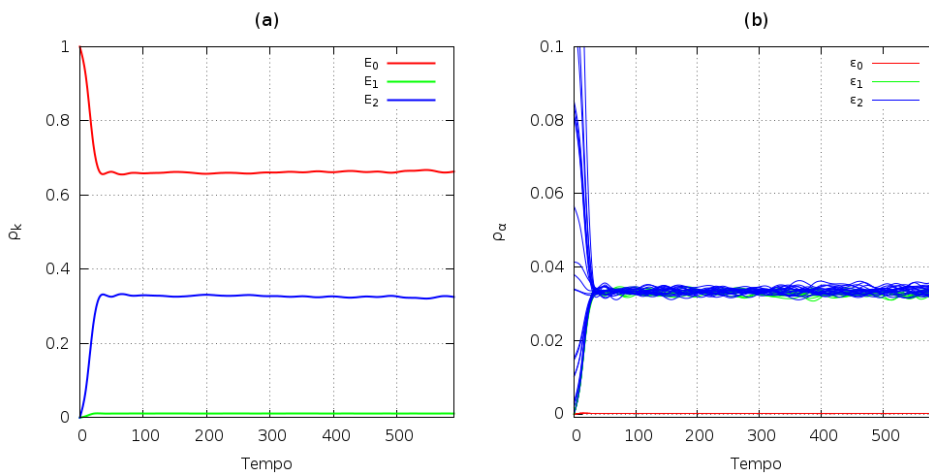


Figura 6.1.7: Em (a), evolução do sistema de 3 níveis. Em (b), evolução do reservatório.

Na figura (6.1.8) observamos a evolução temporal de alguns parâmetros do sistema acoplado. Embora a entropia tenha sido maximizada, nenhum dos dois sistemas apresentou equiprobabilidade de todos os níveis, logo nenhum dos sistemas apresentou o valor máximo de entropia.

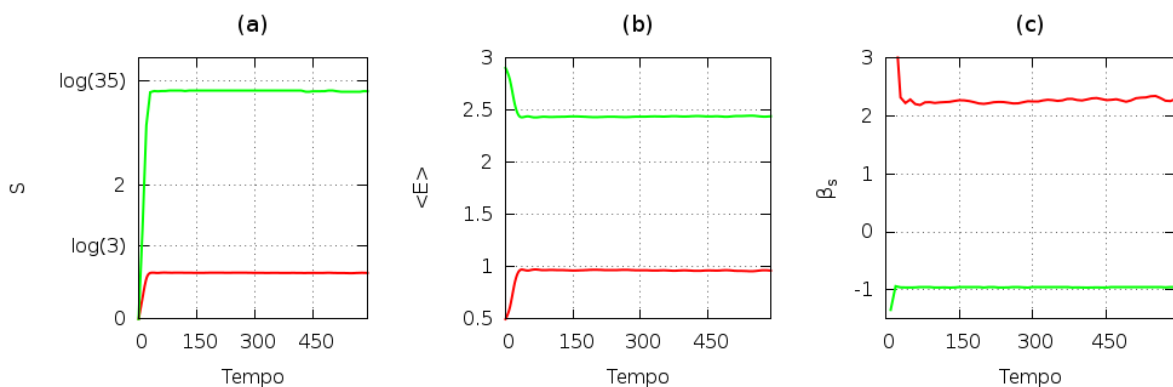


Figura 6.1.8: Entropia de von Neumann, energia média e  $\beta_s$ . As curvas em vermelho correspondem ao sistema de 3 níveis. As curvas em verde, ao reservatório.

Embora não faça muito sentido pensar em uma temperatura convencional para tal distribuição, podemos obter algumas informações importantes a partir da temperatura

espectral. Como o reservatório apresenta uma probabilidade de estado fundamental praticamente nula, temos uma situação de inversão de população, ou seja, a temperatura espectral é negativa.

**Incrementos:**  $\Gamma = 0.8$  e  $\Delta = 1.6$

Por fim, analisamos a terceira região do diagrama (6.1.1). Dada a análise da figura (6.1.2), para  $\Gamma = \frac{\Delta}{2}$  os estados fundamental e primeiro excitado concentraram a maior parte do fluxo de probabilidade do sistema acoplado. Analisando o grafo (6.1.9b) das conexões deste sistema, observamos o porquê.

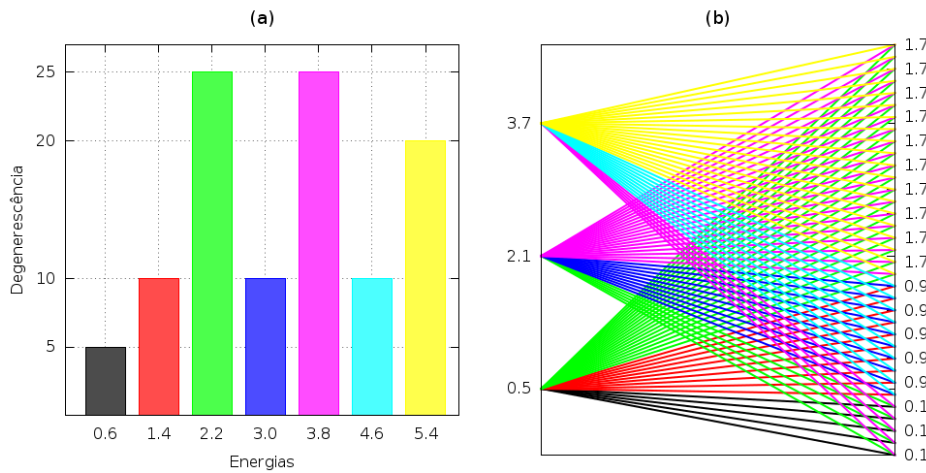


Figura 6.1.9: Histograma e gráfico de energias do sistema composto sujeito a  $\Delta = 1.6$  e  $\Gamma = 0.8$ .

Nesta situação, temos que a corrente de probabilidade é transmitida principalmente pelas linhas verdes, dadas as condições iniciais supostas. Nesta situação, podemos esperar que o fluxo de probabilidade entre os níveis 0.5 e 2.1 será bastante intenso.

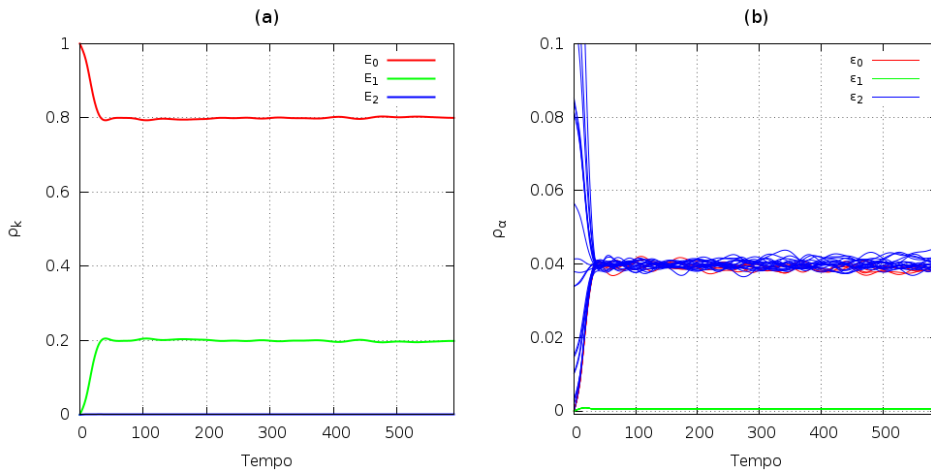


Figura 6.1.10: Não observamos uma distribuição de equilíbrio do tipo Boltzmann. Em (a), sistema de 3 níveis. Em (b), reservatório.



Da mesma forma, temos que a situação de equilíbrio do reservatório será dada pela equiprobabilidade das energias 0.1 e 1.7 ao passo que o primeiro estado excitado não deve ser muito diferente de sua condição inicial. Na figura (6.1.10) estão expostas as curvas de relaxação de ambos sistemas.

Ainda podemos analisar o que acontece com a entropia de von Neumann, energia média e  $\beta_s$  na figura (6.1.11). A entropia não atinge novamente um valor máximo em ambos casos. Embora o reservatório tenha certa probabilidade de estar no estado fundamental, temos que a temperatura espectral é negativa. Este fato é facilmente explicado se comparamos a probabilidade de mensuração de cada nível. Temos 4 vezes mais chance de medir um nível 1.7 do que um nível fundamental.

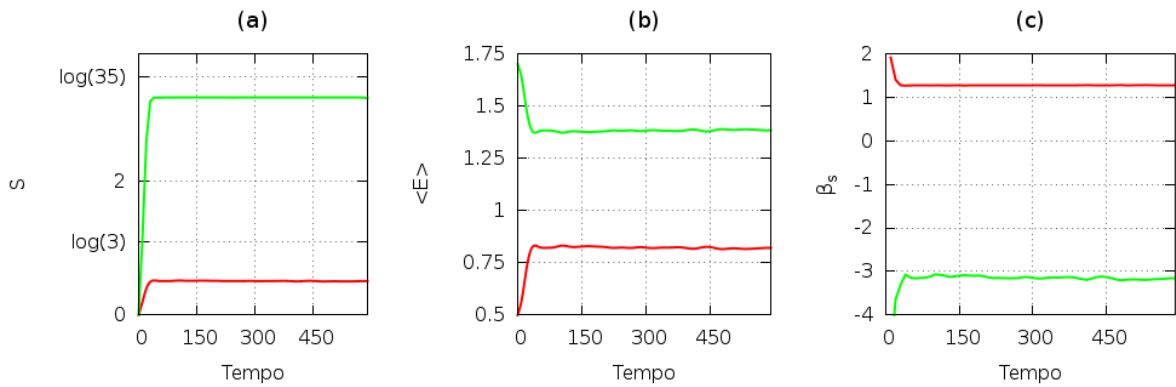


Figura 6.1.11: Entropia, energia média e  $\beta_s$  para  $\Gamma = \frac{\Delta}{2}$ .

### Condições iniciais e interação

Até o presente momento trabalhamos em situações em que o sistema de 3 níveis é iniciado em seu estado fundamental, enquanto o reservatório é iniciado em uma superposição aleatória dos seus níveis de maior energia. Entretanto, esta é uma condição inicial específica, escolhida para fácil análise de algumas propriedades do sistema.

Por outro lado, um sistema sujeito a tais condições iniciais não apresenta correlação quântica em nenhum momento de sua evolução. Isso ocorre devido ao fato deste sistema já se encontrar em uma distribuição de Boltzmann em  $t = 0$ .

Na figura (6.1.12a) escolhemos uma condição inicial completamente aleatória tanto para o sistema quanto para o reservatório. Como citado na análise da figura (6.1.1), percebemos que as regiões em amarelo são aquelas que não apresentam ressonância, isto é, não há fluxo de probabilidade com intensidade relevante. Por outro lado, as funções  $\Gamma = 2\Delta$ ,  $\Gamma = \Delta$  e  $\Gamma = \frac{\Delta}{2}$  persistem.

Todos os pontos destes diagramas foram gerados utilizando a mesma condição inicial, tanto para o sistema de 3 níveis quanto para o reservatório. Dada a distribuição de cores no diagrama, temos que a condição inicial do sistema de 3 níveis deveria ser um caso de inversão de população, uma vez que  $\Gamma = 2\Delta$  é a que mais se aproxima de uma distribuição

de Boltzmann.

Este resultado é condizente com os resultados propostos por Linden [26]. Em suma, temos que nem toda condição inicial é capaz de atingir uma distribuição de equilíbrio térmico.

Em (6.1.12 b-c) temos o mesmo sistema sujeito as mesmas condições iniciais de (6.1.12a), por outro lado, a constante  $\kappa$  (equação 4.0.4) de interação é 10 e 100 vezes maior, respectivamente. O papel da matriz de interação é tornar equiprovável todos os níveis com mesma energia. Pela mesma razão, uma vez que o sistema perde sua degenerescência devido a elevada intensidade da matriz de interação– figura (4.0.2) – todos os níveis devem ter a mesma probabilidade.

Desta forma, quanto maior for a intensidade da matriz de interação, mais próximo de uma distribuição de Boltzmann com temperatura infinita o sistema deve chegar. Entretanto, essa distribuição de equilíbrio não é dada pelo reservatório – como esperado de um sistema interagente – mas pela forte interação.

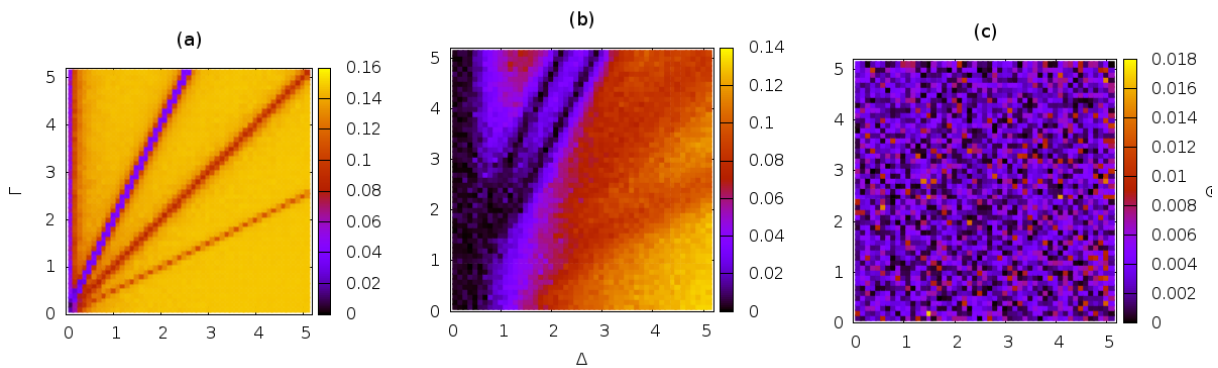


Figura 6.1.12: Diagrama  $\Gamma \times \Delta$  para condições iniciais aleatórias. De (a) até (c) multiplicamos  $\kappa$  – parâmetro de interação – por 10. A medida que a interação aleatória do sistema aumenta, o sistema tende para uma distribuição de Boltzmann com temperatura infinita.

Podemos ainda, analisar o parâmetro  $\Upsilon$  de decoerência definido em (4.0.6) para estes 3 sistemas. Na figura (6.1.13) temos a evolução temporal do ponto  $\Gamma = \Delta = 1$  para as 3 situações da figura (6.1.12). As condições iniciais são as mesmas.

Como podemos observar, a intensidade dos elementos da matriz de interação são inversamente proporcionais ao tempo de coerência quântica. Uma vez que o sistema entra em um regime estacionário (Boltzmann ou não) o sistema já não apresenta mais correlação quântica.

### Sucessão de estados de equilíbrio e picos de entropia

Embora o temperatura espectral não esteja bem definida do ponto de vista termodinâmico para sistemas não termalizados, Gemmer [19] mostrou que esta corresponde ao

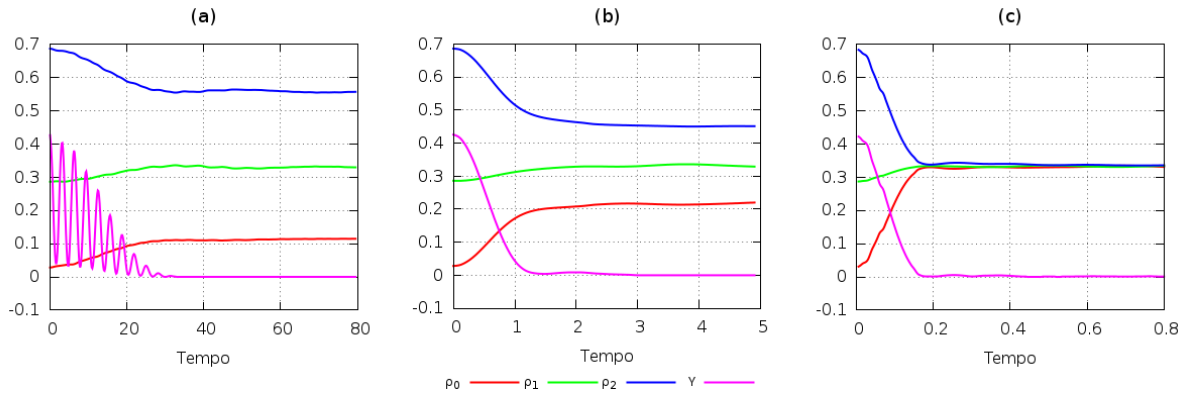


Figura 6.1.13: Em rosa a curva de decoerência para as 3 situações da figura (6.1.12) no ponto  $\Gamma = \Delta = 1$ . Dado o fenômeno de decoerência,  $\Upsilon$  permanece em zero após algum tempo de relaxação.  $\rho_k$  são as probabilidades de ocupação de cada nível.

conceito convencional de temperatura de Boltzmann para sistemas em equilíbrio termodinâmico. Vamos analisar a evolução temporal usando-nos da temperatura espectral em sistemas de baixa dimensionalidade.

Dada a região de maior simetria ( $\Gamma = \Delta$ ) analisamos a dinâmica de sistemas com 2, 3 e 4 níveis. A fim de aproveitar o exemplo, vamos analisar um fenômeno estritamente quântico associando a evolução temporal, o surgimento de picos de entropia.

Desta forma, supomos que os sistemas menores estão em seu estado mais energético em  $t = 0$  e o reservatório em uma superposição aleatória dos seus níveis fundamentais. Na figura (6.1.14) podemos avaliar a dinâmica destes sistemas.

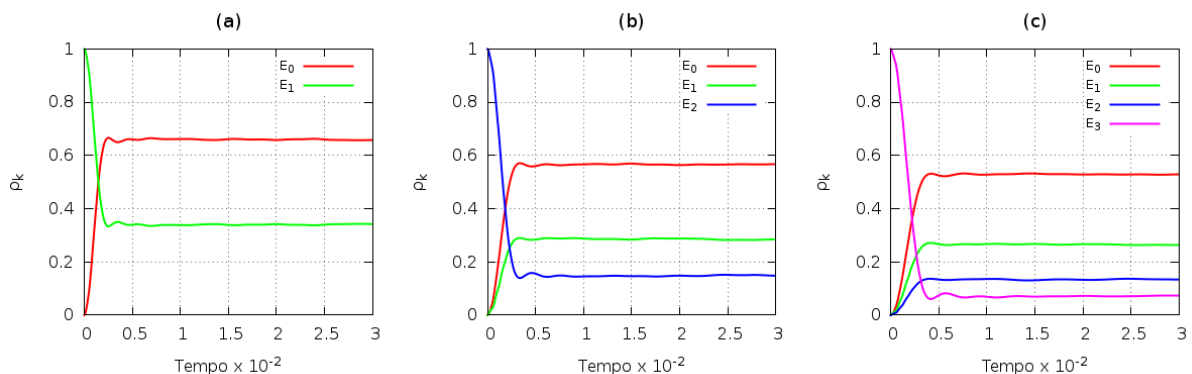


Figura 6.1.14: Dinâmica da distribuição de probabilidades para sistemas de 2,3 e 4 níveis, respectivamente. Todos eles começam em um estado de inversão de população.

Como podemos observar, dadas as condições iniciais, existem intervalos de tempo onde níveis de energia distintos apresentam a mesma probabilidade de mensuração. Na figura (6.1.15) podemos observar este efeito do ponto de vista de entropia. Devido a estes intervalos de equiprobabilidade, a entropia tende para o seu valor máximo, gerando picos. Num sistema de 2 níveis este efeito é maximizado, pois a entropia atinge seu valor máximo. Para sistemas com mais níveis este efeito é diluído.

A presença destes picos implica em uma queda momentânea do valor de entropia. Este decaimento não viola a lei de maximização de entropia, uma vez que este sistema não está nem isolado e nem em equilíbrio térmico, portanto, as leis da termodinâmica não se aplicam necessariamente. Por esta mesma razão, só podemos interpretá-la como uma entropia termodinâmica a partir do regime estacionário ou equilíbrio

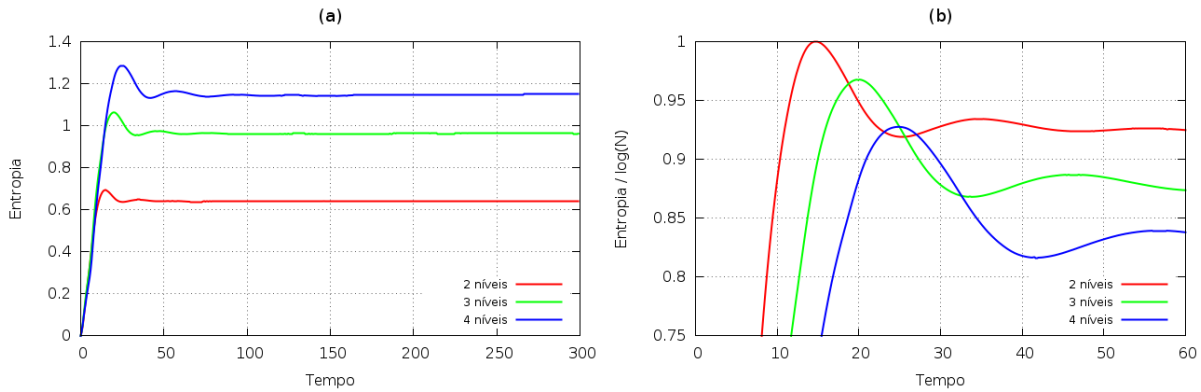


Figura 6.1.15: Picos de entropia. Sistemas de 2,3 e 4 níveis do tipo  $\Gamma = \Delta$ . Em (a), a evolução temporal. Em (b), temos ampliada a região do pico, normalizando por  $\log N$  com  $N = 2, 3, 4$ .

Do ponto de vista de  $\beta_s$  – figura (6.1.16) – observamos o surgimento de valores negativos, ou seja, a temperatura assume valores negativos em regiões fora do equilíbrio. A transição de um regime de inversão de população para um regime de Boltzmann gera uma descontinuidade na curva de temperatura, uma vez que  $\beta_s$  passa por zero.

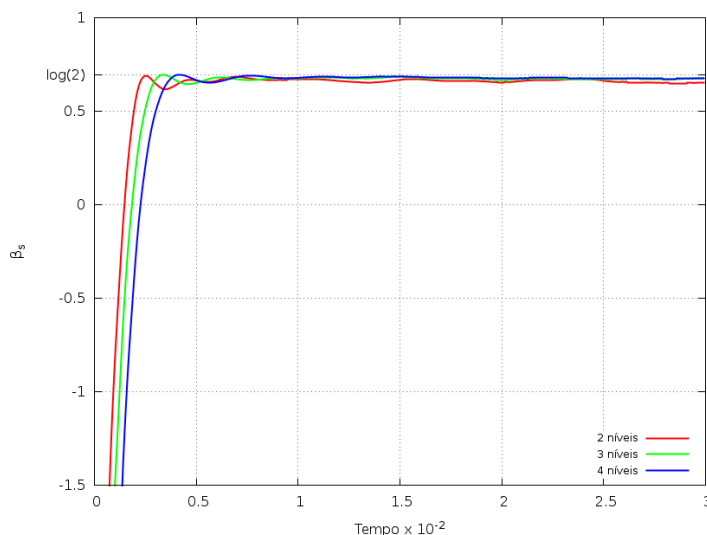


Figura 6.1.16: Inverso da temperatura espectral –  $\beta_s$  – para os 3 sistemas em estudo. Dadas as condições iniciais e simetria do sistema, todos tendem para a mesma temperatura de equilíbrio.

A fim de analisar se estes sistemas evoluem de acordo com uma sucessão de estados de equilíbrio, precisamos calcular suas distribuições de Boltzmann como função de  $\beta$ . Dada

esta distribuição, podemos substituir  $\beta = \beta_s$  e analisar se estes resultados são iguais para todos os instantes de tempo.

Na figura (6.1.17) temos, em preto, a distribuição de Boltzmann em função de  $\beta$  para cada sistema. Em cores, temos a distribuição de probabilidade gerada a partir da temperatura espectral.

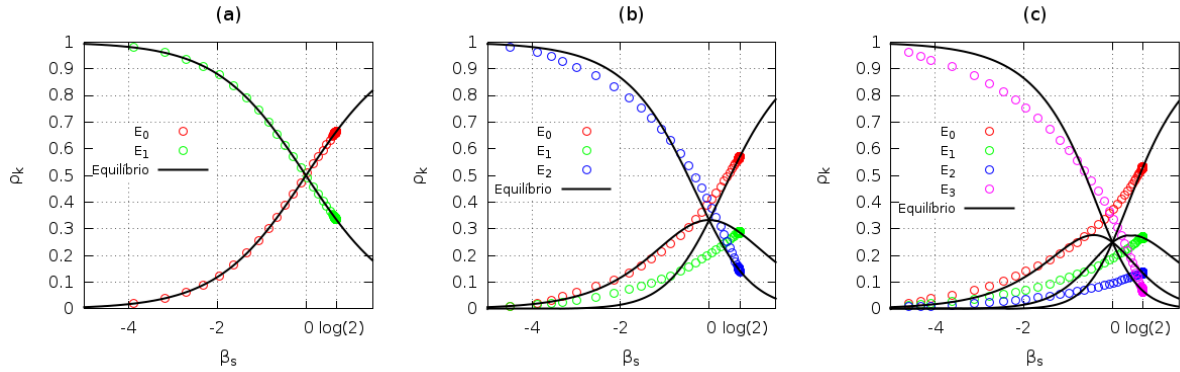


Figura 6.1.17: De modo geral, os sistemas em estudo não evoluem de acordo com um sucessão de estados de equilíbrio. Entretanto, o sistema de 2 níveis é uma exceção devido à normalização de probabilidades.

Exceto para o caso de um sistema com apenas dois níveis, não podemos afirmar que os sistemas em estudo tem uma evolução dada por uma sucessão de estados de equilíbrio, portanto, como Gemmer descreveu, a temperatura espectral não pode ser interpretada de forma idêntica à definição convencional (Boltzmann/Gibbs). O sistema de 2 níveis está sujeito a uma condição de normalização, ou seja, a temperatura depende apenas da ocupação de um dos níveis.

## 6.2 Sistema paramagnético - Spins não interagentes

Da Termodinâmica Clássica temos que dois sistemas acoplados estão em equilíbrio térmico se ambos apresentam uma mesma temperatura. Como já observado até aqui, este comportamento é diferente no limite de sistema quânticos finitos.

Na figura (6.1.5c), observamos que mesmo quando um determinado sistema está em equilíbrio térmico, sua temperatura não é igual àquela apresentada pelo reservatório. Entretanto, ambos sistemas são descritos por uma distribuição de Boltzmann.

Como podemos determinar a temperatura de equilíbrio do sistema acoplado ao reservatório, vamos estudar uma cadeia paramagnética de spins não interagentes. Como este sistema é composto por spins não interagentes, podemos calcular a temperatura local de cada spin desta cadeia. Por fim, uma vez que este sistema se apresenta em equilíbrio, podemos comparar a temperatura espectral de cada spin àquela apresentada por toda a cadeia.

Aplicando um campo magnético sobre estes spins, temos que o Hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H} = -h \sum_k \sigma_k^z, \quad (6.2.1)$$

onde  $h$  é o campo magnético externo na direção  $z$  aplicado sobre os spins e  $\sigma_k^z$  é a matriz de Pauli na direção  $z$ .

Já que estamos interessados em sistemas quânticos de baixa dimensionalidade, vamos estudar um sistema de apenas 3 spins, totalizando 8 níveis de energia. O reservatório apresenta 4 energias distintas com uma degenerescência determinada por  $\beta = \log 2$ . Seu estado fundamental tem degenerescência  $g_0 = 2$ .

Em  $t = 0$ , o reservatório estará em uma superposição completamente aleatória. O sistema de spins está em seu estado fundamental, ou seja, totalmente alinhado com o campo magnético aplicado.

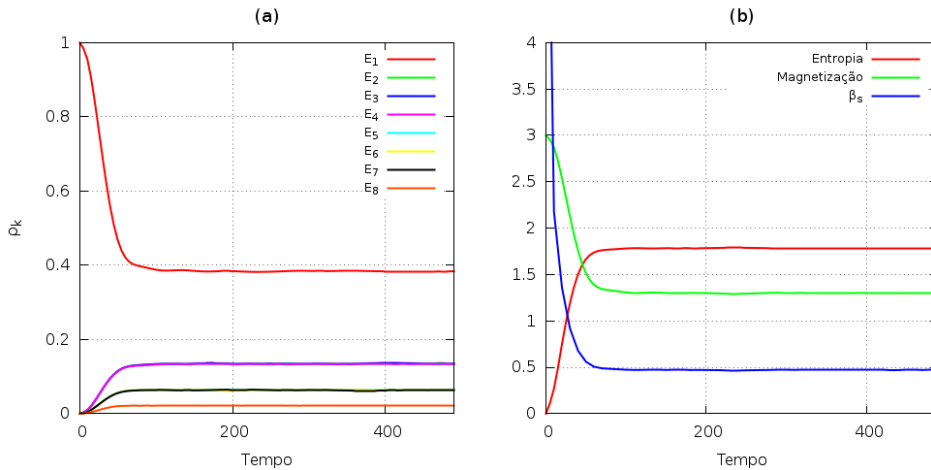


Figura 6.2.1: Em (a), a evolução temporal do sistema de spins sujeito a um campo magnético  $h = 1.0$ . Em (b), temos a entropia, a magnetização e  $\beta_s$  deste sistema no tempo.

Na figura (6.2.1a) expomos a evolução temporal deste sistema de spins. Como esperado, níveis degenerados apresentam a mesma probabilidade de mensuração quando em equilíbrio térmico. Para fins de comparação com o gráfico,  $E_k$  são autovalores dados pelo conjunto  $\{-3.0, -1.0, -1.0, -1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 3.0\}$ , respectivamente.

Em (b), temos a evolução temporal da entropia, magnetização total e  $\beta_s$ . Como podemos observar, temos que o sistema de spins atinge um regime estacionário com  $\langle \beta_s \rangle \approx 0.470 \pm 0.002$ , magnetização total  $\langle M \rangle \approx 1.300 \pm 0.003$  e entropia  $\langle S \rangle \approx 1.786 \pm 0.002$ .

O valor médio de magnetização é calculado a partir da equação

$$\langle M \rangle = Tr(M\rho) \quad (6.2.2)$$

onde

$$M = \sum_k \sigma_k^z. \quad (6.2.3)$$

Neste caso, o Hamiltoniano do sistema é diagonal, portanto o operador  $M$  já está em base conveniente. No capítulo referente ao cálculo de magnetização de uma cadeia de spins interagentes sem campo magnético, precisaremos alterar a base deste operador para a base diagonal do Hamiltoniano Heisenberg-XYZ.

Usando o método de “trace out”, demonstrado na seção 2.3, podemos calcular a matriz densidade reduzida para cada spin. Os elementos diagonais desta matriz densidade são apresentados na figura (6.2.2). Como estes spins não interagem uns com os outros, temos que no equilíbrio todas as distribuições de probabilidade são semelhantes.

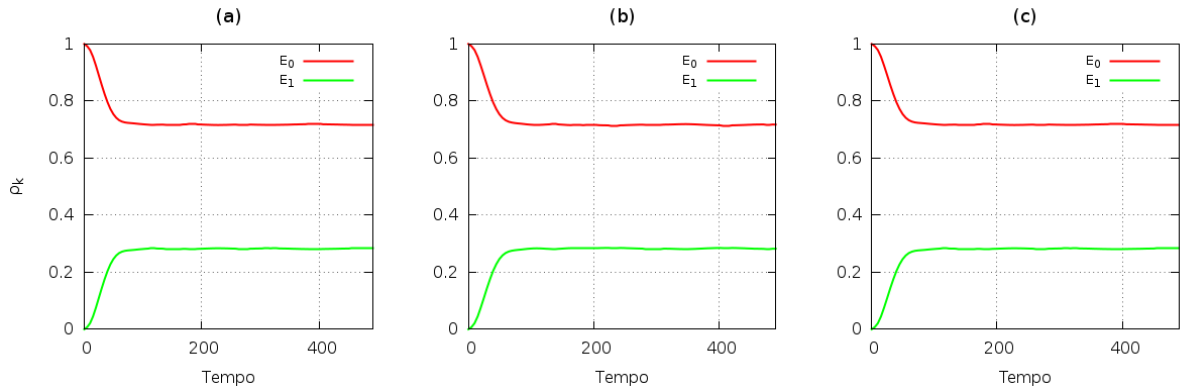


Figura 6.2.2: Probabilidades locais de cada spin do sistema paramagnético. De (a) até (c) temos, respectivamente, as probabilidades do spin 1, 2 e 3.

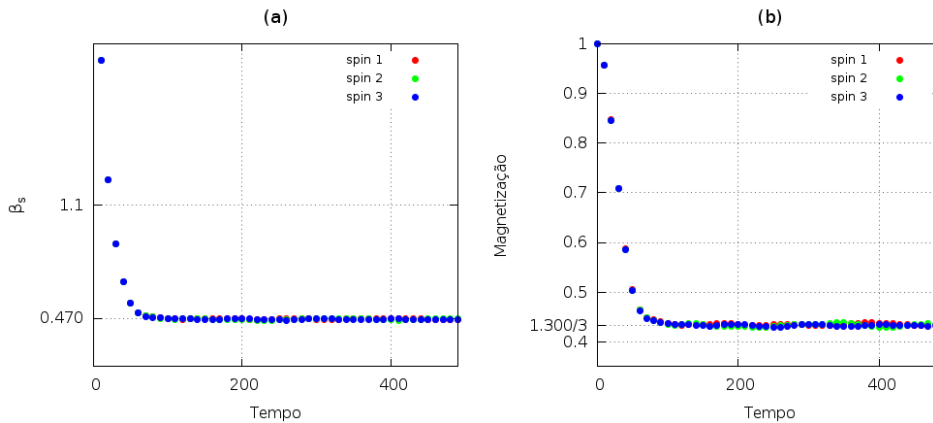


Figura 6.2.3: Em (a), a temperatura espectral e, em (b), a magnetização média de cada spin do sistema. Como não existe interação entre spins, seus valores de equilíbrio são semelhantes.

Na figura (6.2.3) temos a evolução temporal local da temperatura espectral e magnetização média de cada spin do sistema em estudo. Os valores médios entre os 3 spins são:  $\langle M \rangle = 0.433 \pm 0.002$ ,  $\langle \beta_s \rangle = 0.464 \pm 0.003$  e  $\langle S \rangle = 0.596 \pm 0.001$ . Com estes valores

concluimos que a magnetização, a entropia e a temperatura de todos os spins é a mesma no equilíbrio.

Além disso, percebemos que a magnetização por spin é igual a um terço da magnetização total. O mesmo pode ser observado para a entropia. A temperatura por spin é, por sua vez, aproximadamente igual a da cadeia como um todo. Este efeito ocorre devido a falta de interação entre spins na cadeia.



# Capítulo 7

## Sistemas Interagentes

Todos os modelos estudados até o presente momento são compostos por um sistema simples e pequeno acoplado a um reservatório com uma degenerescência bem definida. Entretanto, um sistema físico real geralmente apresenta interações inerentes a sua estrutura. A física de Estado Sólido, por exemplo, é repleta de exemplos desta natureza.

A medida que resfriamos um sólido, isto é, colocamos este sistema em contato com um reservatório térmico<sup>1</sup> com baixa temperatura, este se ordena de uma determinada forma. Esta rede formada é um efeito das interações presentes entre cada átomo ou molécula deste sólido.

Precisamos, portanto, de um modelo para análise de algumas características neste contexto de termodinâmica para sistemas quânticos de baixa dimensionalidade. Já que estudamos um sistema de spins não interagentes no capítulo 6, o passo lógico a ser tomado é inserir algum tipo de interação entre estes spins.

Seguindo o exemplo sugerido no capítulo 4 (decoerência quântica), inserimos uma interação da forma Heisenberg-XYZ [23, 24] de primeiros vizinhos.

$$H_{XYZ} = J_x \sum_{k=2}^N \sigma_{k-1}^x \otimes \sigma_k^x + J_y \sum_{k=2}^N \sigma_{k-1}^y \otimes \sigma_k^y + J_z \sum_{k=2}^N \sigma_{k-1}^z \otimes \sigma_k^z \quad (7.0.1)$$

Uma vez que inserimos interação entre estes spins, temos que o conjunto de autoenergias deste sistema deve ser alterado. Como exemplo, um sistema sem interação sujeito a um campo magnético  $h = 0.5$  apresenta energias  $E_k = \{-1.5, -0.5, -0.5, -0.5, 0.5, 0.5, 0.5, 1.5\}$ . Este conjunto passa a apresentar os valores  $E_k = \{-1.3, -1.1, -0.5, -0.3, -0.1, 0.5, 0.9, 1.9\}$  a partir do momento que temos uma interação do tipo Heisenberg-XXX com  $J_x = J_y = J_z = 0.2$ .

Dado que o processo de termalização depende da existência de ressonâncias entre os sistemas acoplados e que estas ressonâncias estão associadas a compatibilidade de *gaps* de energia dos sistemas acoplados, a distribuição de *gaps* do reservatório utilizada neste trabalho não é suficiente para a termalização. Logo, precisaríamos alterar a distribuição

---

<sup>1</sup>Naturalmente, quando falamos de reservatório térmico em física de estado sólido, nos referimos a um sistema infinito com *gaps* tendendo a zero.

de *gaps* deste reservatório para que ela ocorra.

Felizmente, existem algumas combinações dos coeficientes  $J_k$  que geram uma distribuição de autoenergias compatíveis com a distribuição de *gaps* do reservatório apresentada neste trabalho. De modo geral, distribuições geradas a partir da combinação  $J_x = J_z$  e  $J_y = 0$  apresentam um único incremento para todos os níveis.

Nas subseções seguintes iremos analisar a evolução temporal de um sistema de 3 spins sujeitos a interações do tipo Heisenberg-XYZ. Primeiro analisamos a dinâmica da cadeia de spin como um todo, sem ação de um campo magnético. Depois analisamos um caso onde esta interação é perturbativa a fim determinar a resposta local de cada spin.

## 7.1 Heisenberg-XYZ

Quando estudamos um sistema de spins do ponto de vista quântico, naturalmente supomos que a matriz densidade deste sistema é dada por uma distribuição de Boltzmann. Desta forma, a probabilidade de mensuração de um certo nível é proporcional a sua energia e a temperatura na qual este sistema se encontra.

Por outro lado, a energia total de um sistema de spins não está associada a soma de energias individuais, ou seja, de cada spin, mas sim às energias de interação entre estes. Como precisamos que cada spin tenha sua própria energia para o cálculo da temperatura espectral, não faz sentido realizar um *trace out* neste caso.

Sendo assim, nesta seção analisamos a evolução temporal de um sistema de 3 spins como um todo. Na próxima seção analisamos os efeitos locais.

Dadas as restrições apresentadas pelo tipo de reservatório em uso, não são quaisquer combinações de coeficientes  $J_k$  suscetíveis a termalização. Entretanto, um sistema com coeficientes  $J_x = J_z = J$  e  $J_y = 0$  gera uma conjunto de autoenergias simétrico, ou seja, com um *gap* de energia único entre níveis consecutivos.

Como exemplo de Hamiltoniano deste sistema de 3 spins com condições livres de contorno, tomamos  $J = \frac{1}{2}$ . Logo

$$2H_{xyz} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \mathbb{1}_2 + \mathbb{1}_2 \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (7.1.1)$$

onde as correspondentes autoenergias são

$$E_k = \{-\sqrt{2}, -\sqrt{2}, 0, 0, 0, 0, \sqrt{2}, \sqrt{2}\}, \quad (7.1.2)$$

ou seja, temos incremento  $\Delta = \sqrt{2}$ .

Novamente supomos que toda energia a ser compartilhada pelo sistema completo, está contida no reservatório. Na figura (7.1.1a) temos a evolução temporal deste sistema de

spins com energias dadas por (7.1.2).

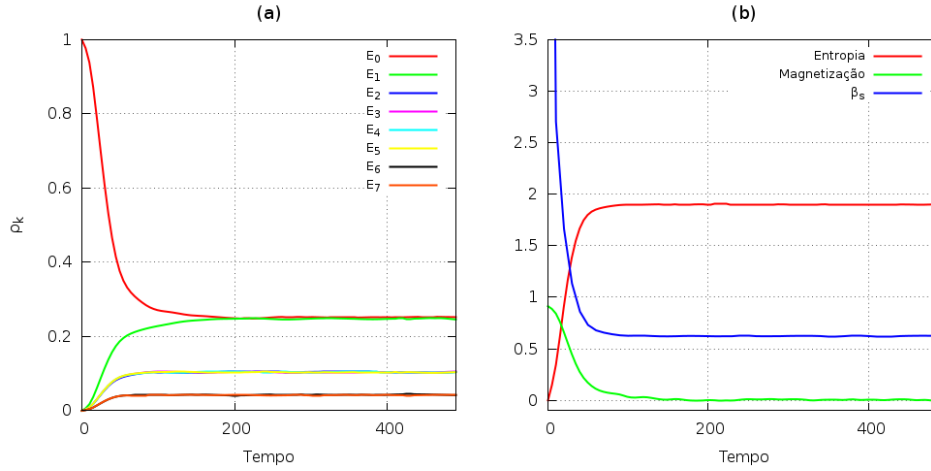


Figura 7.1.1: Evolução temporal de um sistema de 3 spins sujeito a interações do tipo Heisenberg no plano XZ. Dada a existência de interação no plano XZ e a ausência de campo magnético, a magnetização média de equilíbrio é aproximadamente zero.

Como esperado, todos os níveis com mesma energia apresentam mesma probabilidade de mensuração uma vez que o sistema se encontra em equilíbrio térmico. Na figura (7.1.1b) temos expostas as curvas de entropia, magnetização total e inverso da temperatura espectral.

Uma vez que não temos presente a ação de um campo magnético, não existe direção preferencial de projeção de spins. Desta forma, temos que a magnetização média de equilíbrio é aproximadamente zero. Entretanto, este resultado não é intuitivo.

Como estamos trabalhando com apenas 3 spins, esperamos que a magnetização final seja -3, -1, 1 ou 3. Por outro lado, não estamos trabalhando com estados quânticos únicos, mas sim com uma superposição deles. Sendo assim, dadas as probabilidades de ocupação na matriz densidade, temos um intervalo contínuo de magnetização entre -3 e 3, podendo ser, inclusive, zero.

Já que o sistema termaliza, temos que sua entropia é maximizada, com  $\langle S \rangle = 1.902 \pm 0.003$ . A temperatura espectral média pode ser obtida por  $\langle \beta_s \rangle \approx 0.624 \pm 0.005$ .

## 7.2 Spins com interação perturbativa

Na subseção anterior mostramos que um sistema de spins sujeitos a uma interação do tipo Heisenberg pode termalizar. A condição é que o reservatório de energia apresente uma distribuição de *gaps* condizente a estrutura do sistema de spins. Nesta subseção temos por objetivo analisar os efeitos gerados pela inserção de interação entre spins em uma cadeia paramagnética.

Como vimos, em um sistema não interagente de spins – sistema paramagnético – a temperatura espectral de cada spin era igual àquela apresentada por toda a cadeia. Outro

efeito da ausência de interações era que a magnetização média era aproximadamente igual para todos os spins constituintes da cadeia.

Um conjunto de spins não apresenta energia por si só. No sistema paramagnético de spins não interagentes, por exemplo, tínhamos que a energia do sistema era devida ao campo magnético aplicado. Sendo assim, dizemos que a energia de uma rede de spins está associada a energia de interação entre eles. Por esta razão não foi possível analisar os resultados de cada spin na subseção anterior.

Com a presença de um campo magnético externo, porém, podemos escrever a matriz densidade da cadeia em função dos autovetores de cada spin e, assim, calcular suas respectivas matrizes densidade reduzidas. O Hamiltoniano total é escrito como:

$$\mathcal{H} = -h \sum_k \sigma_k^z + J_x \sum_{k=2}^N \sigma_{k-1}^x \otimes \sigma_k^x + J_y \sum_{k=2}^N \sigma_{k-1}^y \otimes \sigma_k^y + J_z \sum_{k=2}^N \sigma_{k-1}^z \otimes \sigma_k^z. \quad (7.2.1)$$

Como o efeito de interação será perturbativo, não existem restrições sob valores de  $J_k$ , senão pela intensidade destes. Analisamos então, um sistema com autoenergias de interação da ordem de 100 vezes menor que as energias do campo magnético. O valor médio dos elementos da matriz de interação com o reservatório são da ordem de  $10^{-5}$ , portanto, 1000 vezes menor que os efeitos de interação entre spins.

Os três coeficientes de interação de primeiros vizinhos foram escolhidos de forma aleatória. O campo magnético externo é dado por  $h = 1$ . O novo conjunto de autoenergias do sistema de 3 spins é dado por

$$E_k = \{-2.997, -1.016, -1.000, -0.998, 0.984, 1.000, 1.012, 3.003\}. \quad (7.2.2)$$

Na figura (7.2.1) temos a evolução temporal deste sistema. Diferente do sistema paramagnético, os níveis de energias não são mais exatamente degenerados, o que implica em uma leve separação das ocupações destes níveis. Em (b), (c) e (d) temos a evolução temporal local, ou seja, de cada spin.

Na figura (7.2.2a) temos a evolução temporal de alguns parâmetros desta evolução. Como o sistema começa com todos os spins alinhados com o campo magnético – estado fundamental – a temperatura espectral é zero e a magnetização é três em  $t = 0$ . Da mesma maneira, temos que o sistema é puramente quântico em  $t = 0$ , logo sua entropia é nula. Os valores médios de equilíbrio calculados para estes parâmetros são:  $\langle \beta_s \rangle \approx 0.477 \pm 0.002$ ,  $\langle S \rangle \approx 1.776 \pm 0.002$  e  $\langle M \rangle \approx 1.326 \pm 0.004$ .

Em (7.2.2b), temos  $\beta_s$  dos 3 spins. Como podemos observar, devido à interação Heisenberg, a temperatura de equilíbrio dos 3 spins é ligeiramente diferente. Por outro lado, a média realizada entre estas 3 temperaturas é igual àquela apresentada pela cadeia.

Em (7.2.2c), temos a magnetização média de cada spin da rede. Mais uma vez podemos observar que os valores de equilíbrio de magnetização dos 3 spins é ligeiramente diferente.

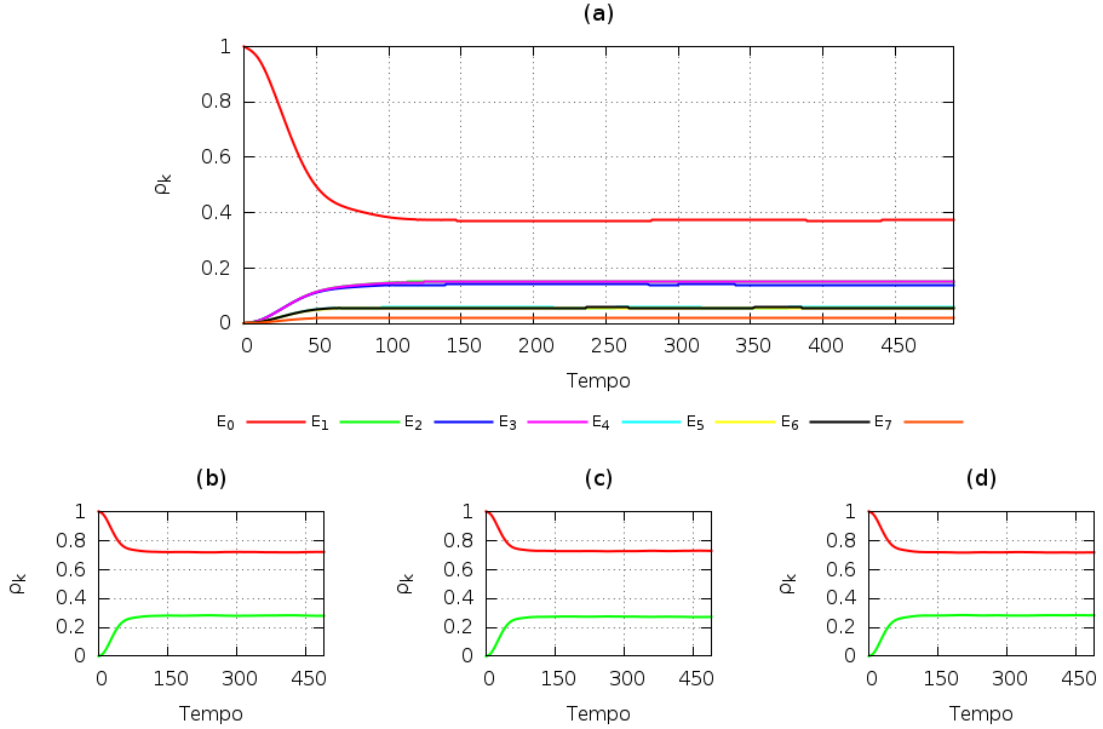


Figura 7.2.1: Evolução temporal da distribuição de probabilidades de um sistema de 3 spins suscetíveis a uma interação Heisenberg-XYZ perturbativa. Em (a) a distribuição do sistema de 3 spins. Em (b),(c) e (d) a distribuição local dos spins 1,2 e 3 respectivamente.

Entretanto, a soma das 3 médias é igual a média global, como deve ser.

Spin	Entropia	$\beta_s$	Magnetização
1	$0.594 \pm 0.001$	$0.470 \pm 0.002$	$0.438 \pm 0.001$
2	$0.586 \pm 0.001$	$0.489 \pm 0.002$	$0.453 \pm 0.001$
3	$0.595 \pm 0.001$	$0.466 \pm 0.002$	$0.435 \pm 0.001$

Tabela 7.1: Valor de equilíbrio para a entropia de von Neuman, a temperatura espectral e a magnetização dos 3 spins que constituem a cadeia em estudo. Podemos observar que a entropia e a magnetização total é igual a soma da entropia e da magnetização dos spins, enquanto a temperatura da cadeia é dada pela média da temperatura de cada spin.

Este resultado já era, de certa forma, esperado. A matriz de interação entre spins quebra a simetria do sistema. Uma vez que isso ocorre, o fluxo de probabilidade entre alguns níveis é mais acentuado que em outros.

Embora este sistema de spins tenha começado sua evolução temporal em seu estado fundamental, o que implica em correlação quântica nula durante todo o intervalo de tempo, o reservatório ao qual esta cadeia está acoplada também é um sistema puramente quântico em  $t = 0$ . A diferença é que este reservatório começa em uma superposição aleatória.

Sendo assim, pensando do ponto de vista do sistema completo (spins + reservatório), o efeito de decoerência está diretamente associado ao reservatório. Na figura (7.2.3) temos

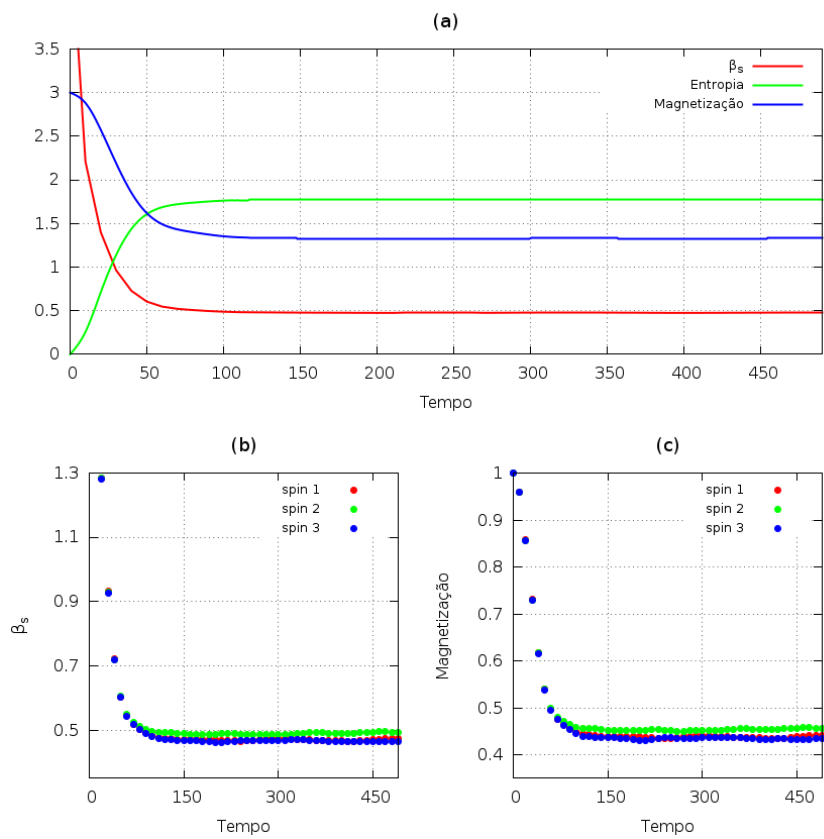


Figura 7.2.2: Evolução temporal de  $\beta_s$ , entropia e magnetização média de um sistema de 3 spins interagentes. Em (a) parâmetros calculados para o conjunto de spins. Em (b) e (c) temos  $\beta_s$  e a magnetização, respectivamente, de cada spin.

as curvas de entropia,  $\beta_s$  e  $\Upsilon^2$ .

Dado que os distribuição aleatória utilizada para a superposição inicial do reservatório é uniforme, temos que a temperatura espectral do reservatório é próxima de infinito, ou seja, aproximadamente todos os níveis tinham a mesma probabilidade. Por ser um sistema puro, sua entropia é nula em  $t = 0$  e sua sua correlação é máxima.

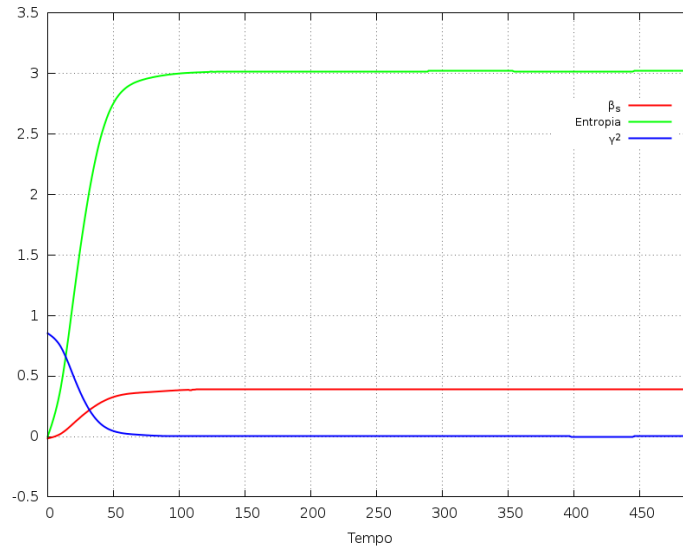


Figura 7.2.3: Curvas de entropia,  $\beta_s$  e decoerência  $\Upsilon^2$  do reservatório acoplado ao sistema de spin perturbativamente interagentes. O reservatório é o único sistema que apresenta correlação quântica em  $t = 0$ .

Ainda podemos observar uma vez que o sistema entra em equilíbrio térmico, o sistema já não possui correlação quântica. Isso implica dizer que o sistema apresenta uma distribuição de probabilidades clássica.

# Capítulo 8

## Discussões e conclusões

Com o surgimento da Mecânica Quântica em meados do século XX, muitos trabalhos foram propostos procurando estabelecer uma conexão entre esta, a Mecânica Estatística e a Termodinâmica Clássica. Embora muitos destes trabalhos tenham cumprido seus objetivos, nenhum deles conseguiu estabelecer uma trajetória conclusiva entre esta emergente teoria quântica e a já conhecida Termodinâmica.

Uma das principais dificuldade de transição entre estas teorias está associada às correlações de probabilidade de níveis energéticos distintos em um sistema quântico. Estas correlações estão diretamente associadas aos elementos não diagonais da matriz densidade de um certo sistema de interesse.

Tanto a Termodinâmica Clássica quanto a Mecânica Estatística são construídas a partir de um princípio variacional, onde a entropia do sistema em estudo deve ser maximizada quando este se encontra em equilíbrio térmico. A distribuição de probabilidades que satisfaz este princípio é conhecida como distribuição (de probabilidades) de Boltzmann.

Dado que qualquer Hamiltoniano é diagonalizável, a distribuição de Boltzmann apresenta elementos não diagonais nulos, ou seja, os autoestados são descorrelacionados a partir do momento que este sistema entra em equilíbrio térmico. Como a proposta é que todo e qualquer sistema é a priori quântico, precisamos entender como esta perda de correlações ocorre.

Tradicionalmente, o fenômeno de decoerência é reproduzido a partir de evoluções estocásticas do sistema. A fim de reproduzir este resultado, implementamos o uso de matrizes de interação aleatórias. Como não podemos controlar flutuações quânticas durante o processo de relação de sistemas, a energia de interação entre estes sistemas pode variar.

No capítulo 4, onde tratamos de decoerência quântica, determinamos um relação direta entre o efeito de decoerência [10, 14] e o Teorema de Semicírculo [25].

A prerrogativa para esta escolha está baseada no método utilizado neste trabalho: sistemas quânticos abertos (*open quantum systems*) [9], onde temos que qualquer sistema observável está contido em outro maior. Neste caso, supomos que um sistema com poucos níveis, acoplado com um reservatório de energia constituem um sistema fechado. Por



outro lado, cada um destes sistemas é individualmente aberto, pois existe fluxo de energia entrando e saindo destes, isto é, existe troca de energia com um meio exterior.

Diferente da maior parte dos métodos empregados na literatura, propomos o parâmetro de decoerência (4.0.6). Como os autovalores da matriz densidade de Boltzmann são iguais aos elementos diagonais desta se o Hamiltoniano está em sua forma diagonal, calculamos a diferença entre estes. Este método tem vantagem sobre outros, pois analisamos a matriz densidade como um todo, e não apenas elementos individuais desta. Através destes métodos, fomos capazes de reproduzir e analisar, ao menos qualitativamente, a transição de um sistema puramente quântico para outro com propriedades clássicas.

Outra dificuldade encontrada ao estudar a dinâmica de termalização de sistemas quânticos está contida no reservatório de energia. Classicamente, interpretamos “banho” como um sistema infinito e contínuo com uma certa temperatura fixa. Uma vez que esta suposição é feita, seu papel é simplesmente impor esta temperatura em outro sistema acoplado a ele após algum tempo de relaxação. Entretanto, nenhuma informação extra sobre o “banho” é obtida.

Como “banho” e temperatura são conceitos essencialmente clássicos, não seria natural supor sua existência ao estudar a transição de sistemas quânticos para o mundo clássico. Por esta razão, empregamos os conceitos de reservatório de energia e temperatura espectral.

Sabemos que mesmo sistemas quânticos trocam energia ao interagirem. Desta forma, precisávamos de um sistema que pudesse receber e entregar energia para um outro sistema a ele acoplado. Esta função deu origem ao seu nome. Além de servir como um reservatório de energia, este sistema deveria impor uma distribuição de Boltzmann ao sistema a ele acoplado a partir do momento em que sua dinâmica alcança-se um regime estacionário. Com este objetivo, determinamos que este reservatório de energia deveria apresentar uma certa degenerescência. Esta degenerescência estava diretamente ligada à temperatura que este sistema poderia impor ao sistema a ele acoplado.

Usando destes artifícios, concluímos que mesmo um sistema quântico pode induzir uma certa temperatura clássica de equilíbrio, o que condiz com os resultados experimentais de Langen et al [22]. Dada a existência de poucos graus de liberdade, porém, temos que a temperatura de equilíbrio de ambos é diferente.

Como calculamos a temperatura destes sistemas usando o conceito de temperatura espectral, podemos assumir que esta temperatura de equilíbrio tem interpretação idêntica à clássica uma vez que o sistema alcança o equilíbrio térmico. Isso ocorre, pois Gemmer demonstrou a equivalência dos conceitos no limite de termalização [19].

Ainda é necessário analisar se este reservatório de energia pode ser considerado um banho clássico a partir do momento que perde sua correlação quântica. Neste caso, o reservatório precisa ter mais graus de liberdade, o que está fora do escopo deste trabalho.

Por outro lado, temos que a distribuição de *gaps* deste reservatório utilizado não é capaz de termalizar qualquer sistema. O diagrama (6.1.12a) mostra que existem algumas

combinações de incrementos de energia que não geram uma distribuição de equilíbrio do tipo Boltzmann.

Procurando entender como o fluxo de probabilidade ocorre no sistema completo, sugerimos neste trabalho a utilização de grafos bipartidos (capítulo 6). Uma vez construído o grafo, podemos observar o caminho pelo qual a probabilidade é transferida de um nível para o outro. Desta forma, podemos determinar de antemão se a distribuição de *gaps* deste sistema acoplado poderá ou não termalizar.

Tradicionalmente, em Termodinâmica dizemos que a energia de interação de dois sistemas é bastante fraca<sup>1</sup>. Por outro lado, esta abordagem é capaz de explicar a distribuição de probabilidades de equilíbrio inclusive de sistemas acoplados sujeitos a uma matriz de interação forte.

Por fim, fomos capazes de observar diferenças de comportamento de equilíbrio entre sistemas com e sem interação acoplados ao reservatório de energia. Para este fim analisamos uma cadeia de spins sujeita a um campo magnético externo.

De certa forma, o resultado obtido para o sistema paramagnético de spins não interagentes era intuitivo. Uma vez que estes interagem com o reservatório, mas não entre si, o reservatório acaba impondo uma ocupação final com certa temperatura a todos os spins da cadeia.

Entretanto, o efeito da inserção de elementos não diagonais no Hamiltoniano destes spins não era claro. Como resultado deste estudo, concluímos que cada spin apresentava uma temperatura de equilíbrio e magnetização distinta. Todavia, observamos que a média destas temperaturas locais de equilíbrio é igual a temperatura média de equilíbrio da cadeia completa. Além disso, temos que a soma da magnetização e entropia local é igual a magnetização e entropia total do sistema.

Dado este resultado, podemos acertar sobre a existência das flutuações espaciais de temperatura e magnetização de sistemas clássicos. Como a dinâmica de sistemas quânticos **interagentes** recai em uma condição de termalização onde spins distintos de uma cadeia apresentam temperatura e magnetização distintas, estas flutuações espaciais estão diretamente ligadas a existência de interação entre os diversos subsistemas constituintes de um outro maior.

## 8.1 Perspectivas

Existem algumas ideias que foram pouco ou não exploradas no decorrer deste trabalho. A primeira delas está associada ao parâmetro de decoerência (4.0.6). Como este parâmetro traz consigo a informação de quão quântico um determinado sistema ainda é, podemos realizar uma análise sobre o tempo de relaxação desta condição quântica (perda de correlações quânticas) para alguns sistemas. A ideia é relacionar este tempo de perda de

---

<sup>1</sup>Se comparada a energia do reservatório e outro sistema de interesse.

correlação quântica ao tamanho do sistema e às possíveis interações as quais este sistema está sujeito. Existe ainda a possibilidade de associar este efeito de perdas de correlação a caminhantes aleatórios quânticos.

Outra ideia a ser explorada são as possíveis estruturas de reservatório a fim de propiciar ressonâncias que levem um sistema qualquer a uma distribuição de equilíbrio de Boltzmann. Ainda referente ao reservatório, podemos nos indagar se este reservatório pode ser interpretado como um “banho” do ponto de vista termodinâmico a partir do momento em que ele se encontra em um regime estacionário.

Por fim, a ideia de associar grafos ao fluxo de probabilidades de ocupação parece ser bastante poderosa. Uma vez que temos o grafo de um certo sistema quântico acoplado ao reservatório, podemos determinar se este sistema poderá termalizar ou não. O próximo passo seria investir em métodos de evolução estocástica – como um caminhante aleatório, por exemplo – e comparar com os resultados obtidos através da equação de Schrödinger utilizadas neste trabalho.

# Bibliografia

- [1] H.B. Callen. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. Wiley, 1985. ISBN: 9780471862567.
- [2] R. Kubo. *Thermodynamics: An advanced course with problems and solutions*. North-Holland Pub. Co., 1968.
- [3] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloe. *Quantum Mechanics, 2 Volume Set*. Wiley, 1992. ISBN: 978-0-471-56952-7.
- [4] J.J. Sakurai e San Fu Tuan. *Modern quantum mechanics*. Vol. 1. Addison-Wesley Reading, Massachusetts, 1985.
- [5] H.J. Groenewold. «On the principles of elementary quantum mechanics». Em: *Physica* 12.7 (1946), pp. 405–460.
- [6] J. E. Moyal. «Quantum mechanics as a statistical theory». Em: *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 45 (01 jan. de 1949), pp. 99–124.
- [7] John Von Neumann. *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Vol. 42. 1932. ISBN: 3540592075.
- [8] L.D. Landau e E.M. Lifshitz. *Statistical Physics, Part 1*. 1980. ISBN: 0-08-023039-3.
- [9] E. Joos et al. *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*. Springer Berlin Heidelberg, 2010. ISBN: 9783642055768.
- [10] W.H. Zurek. «Decoherence and the transition from quantum to classical—revisited». Em: *Los Alamos Science* 27 (2002), pp. 2–25.
- [11] K. Huang. *Statistical Mechanics*. Wiley, 1987. ISBN: 9780471859130.
- [12] L.E. Reichl. *A Modern Course in Statistical Physics*. Physics textbook. Wiley, 2009. ISBN: 9783527407828.
- [13] M.A. Nielsen e I.L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge Series on Information and the Natural Sciences. Cambridge University Press, 2000. ISBN: 9780521635035.
- [14] W.H. Zurek e J.P. Paz. «Quantum chaos: a decoherent definition». Em: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 83.1–3 (1995). Quantum Complexity in Mesoscopic Systems, pp. 300–308.

- [15] K. Blum. *Density Matrix Theory and Applications*. Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics. Springer, 2012. ISBN: 9783642205613.
- [16] M. Srednicki. *The approach to thermal equilibrium in quantized chaotic systems*. 1999.
- [17] G. Lindblad. «On the generators of quantum dynamical semigroups». Em: *Comm. Math. Phys.* 48.2 (1976), pp. 119–130. URL: <http://projecteuclid.org/euclid.cmp/1103899849>.
- [18] C.A. Brasil, F.F. Fanchini e R.J. Napolitano. «A simple derivation of the Lindblad equation». Em: *Revista Brasileira de Ensino de Física* 35.1 (2013), pp. 01–09.
- [19] J. Gemmer, M. Michel e G. Mahler. *Quantum Thermodynamics: Emergence of Thermodynamic Behavior Within Composite Quantum Systems*. Lecture Notes in Physics. Springer, 2009. ISBN: 9783540705093.
- [20] N.W. Ashcroft e N.D. Mermin. *Solid State Physics*. HRW international editions. Holt, Rinehart e Winston, 1976. ISBN: 9780030839931.
- [21] R.V. Jensen e R. Shankar. «Statistical Behavior in Deterministic Quantum Systems With Few Degrees of Freedom». Em: *Phys.Rev.Lett.* 54 (1985), p. 1879.
- [22] T. Langen et al. «Local emergence of thermal correlations in an isolated quantum many-body system». Em: *Nature Physics* 9 (2013), pp. 640–643.
- [23] R.Orbach. «Linear antiferromagnetic chain with anisotropic coupling». Em: *Physical Review* 112.2 (1958), p. 309.
- [24] E. Lieb, T. Schultz e D. Mattis. «Two soluble models of an antiferromagnetic chain». Em: *Annals of Physics* 16.3 (1961), pp. 407–466.
- [25] M.L. Mehta. *Random Matrices*. Pure and Applied Mathematics. Elsevier Science, 2004. ISBN: 9780080474113.
- [26] N. Linden et al. «Quantum mechanical evolution towards thermal equilibrium». Em: *Physical Review E* 79.6 (2009), p. 061103.
- [27] A. Eckhardt W.and Heinecke. «SuperMUC boosts the largest molecular dynamics simulation by 4X in Number of Particles». Em: *inSiDE* 11.1 (2013).
- [28] M.A. Cazalilla e M. Rigol. «Focus on dynamics and thermalization in isolated quantum many-body systems». Em: *New Journal of Physics* 12.5 (2010), p. 055006.
- [29] J.L. Szwarcfiter. *Grafos e Algoritmos Computacionais. V.1*. Rio de Janeiro: Editora Campus, 1984.
- [30] M. Rigol, V. Dunjko e M. Olshanii. «Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems.» Em: *Nature* 452 (2008), pp. 854–858.

- [31] K. Saito, S. Takesue e S. Miyashita. «System-Size Dependence of Statistical Behavior in Quantum System». Em: *Journal of the Physical Society of Japan* 65.5 (1996), pp. 1243–1249.
- [32] K. Saito, S. Takesue e S. Miyashita. «Thermal conduction in a quantum system». Em: *Physical Review E* 54.3 (1996), p. 2404.
- [33] F. Jin et al. «Quantum decoherence scaling with bath size: Importance of dynamics, connectivity, and randomness». Em: *Phys. Rev. A* 87 (2 2013), p. 022117.
- [34] V.I. Yukalov. «Equilibration and thermalization in finite quantum systems». Em: *Laser Physics Letters* 8.7 (2011), p. 485.
- [35] L.H.A. Monteiro. *Sistemas dinâmicos*. Editora Livraria da Física, 2006. ISBN: 9788588325081.

# Apêndice A

## Logaritmo e exponencial de matrizes não-diagonais

O cálculo do logaritmo natural e exponencial de matrizes quaisquer pode ser complicado. Existem alguns métodos gerais comumente utilizados para este fim [35], mas estamos interessados apenas no caso de matrizes diagonalizáveis neste trabalho. Desta forma, podemos recorrer às propriedades de matrizes diagonais no cálculo destas funções.

Supondo  $A$  uma matriz diagonalizável qualquer e  $\Lambda$  a matriz de seus autovetores, temos que  $D = \Lambda^\dagger A \Lambda$ , onde  $D$  é a matriz dos autovalores de  $A$ . Ademais, temos  $\Lambda^\dagger \Lambda = \Lambda \Lambda^\dagger = \mathbb{1}$ .

Para efetuar o cálculo do logaritmo natural da matriz  $A$ , podemos utilizar a expansão de Taylor:

$$\log(A) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} (A - \mathbb{1})^k. \quad (\text{A.0.1})$$

Expandindo e multiplicando o operador identidade nas proximidades de todas as matrizes  $A$  obtemos:

$$\begin{aligned} \log(A) &= (A - \mathbb{1}) - \frac{1}{2} (A - \mathbb{1}) (A - \mathbb{1}) + \dots \\ &= \Lambda \Lambda^\dagger (A - \mathbb{1}) \Lambda \Lambda^\dagger - \frac{1}{2} \Lambda \Lambda^\dagger (A - \mathbb{1}) \Lambda \Lambda^\dagger (A - \mathbb{1}) \Lambda \Lambda^\dagger + \dots \\ &= \Lambda (\Lambda^\dagger A \Lambda - \Lambda^\dagger \Lambda) \Lambda^\dagger - \frac{1}{2} \Lambda (\Lambda^\dagger A \Lambda - \Lambda^\dagger \Lambda) (\Lambda^\dagger A \Lambda - \Lambda^\dagger \Lambda) \Lambda^\dagger + \dots \\ &= \Lambda (D - \mathbb{1}) \Lambda^\dagger - \frac{1}{2} \Lambda (D - \mathbb{1}) (D - \mathbb{1}) \Lambda^\dagger + \dots \\ &= \Lambda \left[ \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} (D - \mathbb{1})^k \right] \Lambda^\dagger \\ &= \Lambda \log(D) \Lambda^\dagger, \end{aligned} \quad (\text{A.0.2})$$

onde

$$\log(D) = \begin{pmatrix} \log(\lambda_0) & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \log(\lambda_N) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.0.3})$$

com  $\lambda_i$  sendo os autovalores da matriz  $A$ .

Um cálculo semelhante pode ser realizado no caso da exponencial de uma matriz diagonalizável. Utilizando a expansão de Taylor

$$e^A = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k, \quad (\text{A.0.4})$$

podemos escrever

$$\begin{aligned} e^A &= \mathbb{1} + \Lambda \Lambda^\dagger A \Lambda \Lambda^\dagger + \frac{1}{2!} \Lambda \Lambda^\dagger A \Lambda \Lambda^\dagger A \Lambda \Lambda^\dagger + \cdots = \Lambda \Lambda^\dagger + \Lambda D \Lambda^\dagger + \frac{1}{2!} \Lambda D^2 \Lambda^\dagger + \cdots \\ &= \Lambda \left[ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} D^k \right] \Lambda^\dagger = \Lambda e^D \Lambda^\dagger, \end{aligned} \quad (\text{A.0.5})$$

onde

$$e^D = \begin{pmatrix} e^{\lambda_0} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & e^{\lambda_N} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.0.6})$$



# Apêndice B

## Código: Python3 e C/C++

Temos por objetivo, neste apêndice, analisar algumas partes mais relevantes dos algoritmos escritos para fim da obtenção dos gráficos apresentados neste trabalho. Embora cada sistema tenha o seu Hamiltoniano próprio, o reservatório de energia, a evolução temporal e os traços parciais são algo em comum para todos os códigos utilizados.

A maior parte dos códigos escritos para este trabalho são dados pela combinação de Python3 com C/C++ com precisão “float”. Em geral, a construção dos Hamiltonianos e as condições iniciais são realizadas em Python3 com auxílio do pacote Numpy. A evolução temporal, assim como a construção das matrizes de interação aleatórias e os traços parciais foram feitos em C/C++ com auxílio dos pacotes OpenMP<sup>1</sup>, Gnu Scientific Library<sup>2</sup> e LAPACK<sup>3</sup>. A conexão entre ambas linguagens foi feita com Swig<sup>4</sup>.

Começamos pelas funções em Python3. Como exemplo, segue a função responsável pela construção do reservatório e da cadeia de spins Heisenberg. Primeiro construímos as energias do reservatório. Em seguida, a matriz de interação do tipo Heisenberg. Por fim, diagonalizamos o sistema para a evolução temporal. Note a importância de guardamos a matriz dos autovetores do Heisenberg-XYZ se necessário calcular a matriz densidade reduzida de seus spins constituintes.

```
def init_energy(spins, Jx, Jy, Jz, h, lev_R, deg_o, dE, s, H):
    chain=np.zeros((s.A, s.A), float)

    # Criando as autoenergias para o reservatório
    a=0
    for k in range(0, lev_R):
        xo=int(deg_o*(pow(2,k)-1));    xf=int(deg_o*(pow(2,k+1)-1));
        for l in range(xo, xf):
            H.R[a]=float(k*dE+.5);    a+=1;
```

---

<sup>1</sup><https://computing.llnl.gov/tutorials/openMP/>

<sup>2</sup><http://www.gnu.org/software/gsl/>

<sup>3</sup><http://www.netlib.org/lapack/lapacke.html>

<sup>4</sup><http://www.swig.org/>

```

#Campo magnético sobre um único spin
spi=np.zeros((2,2),float); spi[0][0]=-h; spi[1][1]=h;
#Criando matriz de interação entre primeiros vizinhos
xyz=np.zeros((4,4),float)
xyz[0][0]=Jz;    xyz[0][3]=Jx-Jy;
xyz[1][1]=-Jz;   xyz[1][2]=Jx+Jy;
xyz[2][1]=Jx+Jy; xyz[2][2]=-Jz;
xyz[3][0]=Jx-Jy; xyz[3][3]=Jz;

# Inicializando o campo magnético sobre toda a cadeia
if(h > 0.):
    for k in range (0,spins):
        chain+=np.kron(np.identity(math.pow(2,k)), \
                        np.kron(spi,np.identity(math.pow(2,spins-k-1))))

# Inicializando a interação spin-spin
for k in range(0,spins-1):
    chain+=np.kron(np.identity(math.pow(2,k)), \
                    np.kron(xyz,np.identity(math.pow(2,spins-k-2))))

H.A,H.vec=np.linalg.eig(chain) # Calculando autovalores e autovetores
idx=H.A.argsort()             # Organizando por ordem de tamanho
H.A=H.A[idx]
H.vec=H.vec[:,idx]

# Construindo Hamiltoniano diagonal do sistema completo
for k in range(s.A):
    for l in range(s.R):
        H.tot[k*s.R+1]=H.A[k]+H.R[l]

del idx
return H

```

A função responsável pelas condições iniciais de qualquer sistema é dada por:

```

def initial_conditions(s,phi):
    # O sistema A começa em seu estado fundamental
    vecA=np.zeros(s.A,float); vecA[0]=1.;

    # O reservatório começa em uma superposição aleatória

```

```

vecR=np.random.random_sample(s.R)
vecR=vecR/np.linalg.norm(vecR)

# Construindo a superposição do sistema completo
for k in range(s.A):
    for l in range(s.R):
        phi[k*s.R+1]=vecA[k]*vecR[l]

return phi

```

Neste caso, temos que o sistema começa em seu estado fundamental e o reservatório em uma superposição aleatória.

Agora podemos analisar as funções associadas a dinâmica do sistema. Começamos, desta forma, a parte do código escrita em C.

Como a matriz de interação aleatória apresenta uma distribuição gaussiana, precisamos de uma função geradora de números distribuídos de acordo com uma gaussiana. O método mais comum é o de Box-Müller, disponível no “Numerical Recipes”.

```

void box_muller (float *n1,float *n2, gsl_rng *ran)
{
    float x,y,r,d;
    do{
        x=2.0*gsl_rng_uniform(ran)-1.0;
        y=2.0*gsl_rng_uniform(ran)-1.0;
        r=x*x+y*y;
    }while(r==0.0 || r>1.0);
    d=sqrt(-2.0*log(r)/r); *n1=d*x; *n2=d*y;
}

```

Em suma, Box-Müller usa o método da transforma inversa sujeita as seguintes transformações de variáveis:

$$y_1 = \sqrt{-2\log(x_1)} \cos(2\pi x_2) \quad y_2 = \sqrt{-2\log(x_1)} \sin(2\pi x_2), \quad (\text{B.0.1})$$

onde  $y_k$  são números gaussianos e  $x_k$  são uniformes. Desta forma, geramos dois números aleatórios gaussianos a partir de dois aleatórios uniformes. Para implementar este código, tomamos que  $x_1$  e  $x_2$  formam uma circunferência de raio menor que 1, mas diferente de zero. Desta forma, temos que estes passam a representar um seno e um cosseno desta circunferência.

Poderíamos ter gerado os números aleatórios uniformes utilizando a função `rand()` da biblioteca `<stdlib>`, porém o pacote “Gnu Scientific Library” oferece um gerador melhor:

*mt19937*, com autonomia de bilhões de números com boa aleatoriedade. Poderíamos ter utilizado o próprio gerador de números gaussianos aleatórios do pacote, entretanto, esta função utiliza Box-Müller, retornando apenas um número aleatório. Desta forma, é mais eficiente usar a função geradora de números uniformemente distribuídos e gerar dois números gaussianos para cada 2 uniformes.

Uma vez que já sabemos gerar números aleatórios com uma distribuição gaussiana, podemos focar na construção da matriz de interação aleatória definida pela equação (4.0.4). Uma vez que a interação de um determinado nível com ele mesmo não acrescenta em nada à dinâmica do sistema, tomamos os elementos diagonais da matriz de interação igual a zero. De forma geral, temos que a matriz de interação é uma matriz complexa hermitiana.

```
void interaction(int N, energy *H, gsl_rng *ran,float kappa)
{
    unsigned int k,l,a;
    float a1,a2;
    float complex norma;
    float complex **inter=COMPLEX_MATRIX(N,N);

    // Gerando matriz hermitiana de interação
    for(k=0;k<N;k++)
        for(l=k+1;l<N;l++)
            {box_muller(&a1,&a2,ran); inter[k][l]=a1+a2*I; inter[l][k]=a1-a2*I;}

    // Normalizando e multiplicando por kappa: kappa/Tr(A^2)
    norma=0.+0.*I;
    for(k=0;k<N;k++) for(l=0;l<N;l++) norma+=inter[k][l]*inter[l][k];
    for(k=0;k<N*N;k++) inter[0][k]*=kappa/norma;

    // Escrevendo interação no Hamiltoniano completo
    for(k=0;k<N;k++)
        for(l=0;l<N;l++)
            if(l!=k)
                H->tot[k][l]=inter[k][l];

    FREE_MATRIX(inter);

    int info,N2=2*N;
    float *A=VECTOR(N2*N2), *W=VECTOR(N2);

    for(k=0;k<N;k++)
```

```

for(l=0;l<N;l++)
{
    A[k*N2+1]=FLOAT(creal(H->tot[k][l]));
    A[(k+N)*N2+1+N]=FLOAT(creal(H->tot[k][l]));
    A[k*N2+1+N]=FLOAT(-cimag(H->tot[k][l]));
    A[(k+N)*N2+1]=FLOAT(cimag(H->tot[k][l]));
}

// Usando LAPACK para diagonalizar o Hamiltoniano completo
info=LAPACKE_ssyevd(LAPACK_COL_MAJOR,'V','U',N2,A,N2,W);
if(info!=0) puts("Error diagonalizing matrix!");

// Acelerando processo do operador de evolução temporal
for(k=0;k<N;k++)
{
    H->eig[k]=W[2*k];
    for(l=0;l<N;l++)
        for(a=0;a<N;a++)
            H->V[k*N2+1][a]=(A[2*a*N2+k]+I*A[2*a*N2+k+N])*
                (A[2*a*N2+1]-I*A[2*a*N2+1+N]);
}
FREE_VECTOR(A); FREE_VECTOR(W);
}

```

Dada a matriz de interação, precisamos determinar a função responsável pelo cálculo do operador de evolução temporal. Nesta função precisamos calcular a exponencial de uma matriz não-diagonal, o que implica em diagonalizá-la e transformar a base do operador para sua forma original, como visto no apêndice A.

A diagonalização foi realizada na função anterior e, embora a dimensão destas matrizes sejam relativamente grandes, é computacionalmente “barato”. Por outro lado, a transformação de base envolve a multiplicação de 3 matrizes grandes. Sendo assim, utilizamos o pacote OpenMP para paralelizar esta função.

```

void schroedinger(size s,energy *H,evolva *ev,float tmax, float dt,
    float complex **output,int count, int ensemble, float to)
{
    unsigned int k,l,a;
    float t,*eig=H->eig,*phi=ev->phi;
    float complex *phit=ev->phit;
    float complex **U=ev->U,**V=H->V;
}

```

```

for(t=0.;t<tmax;t+=dt)
{
    // Entrando em regime de processamento paralelo
#pragma omp parallel shared(eig,U,V,t,phit,phi) private (k,l,a)
    {
        // Cálculo do operador de evolução temporal
#pragma omp for schedule (dynamic,CHUNKSIZE) nowait
for(k=0;k<s.N;k++)
    {
        for(l=0;l<s.N;l++)
            { U[k] [l]=.0+.0*I;
              for(a=0;a<s.N;a++) U[k] [l]+=V[k*s.N+1] [a]*cexp(-I*eig[a]*t); }
    }

    // Esperando que todas as threads terminem seu serviço
#pragma omp barrier
{}

// Calculando a superposição de autovetores para o tempo t
#pragma omp for schedule (dynamic,CHUNKSIZE) nowait
for(k=0;k<s.N;k++)
    {
        phit[k]=0.+0.*I; for(l=0;l<s.N;l++) phit[k]+=U[k] [l]*phi[l];
    }
}

// Chamando função de trace out
    work_result(s,phit,INT(floor(t/dt)),output);
}

```

Uma vez que a superposição de autovetores é calculada para o tempo  $t$ , realizamos o “trace out” do reservatório. De modo geral, poderíamos implementar a equação (2.3.6), mas este é um processo deveras lento – ainda mais se associado ao cálculo do autovetor para o sistema completo no tempo  $t$ . Desta forma, o sistema completo (sem interação aleatória) é tratado sempre em sua forma diagonal, isto é, temos autovetores euclidianos, o que facilita e acelera o código. Caso necessário, mudamos a base da matriz densidade para a original depois do traço parcial.

```

// Calculando os elementos diagonais da matriz reduzida do sistema A
for(k=0;k<s.A;k++)

```

```

    {
        prob=.0+.0*I;
        for(a=0;a<s.R;a++)
prob+=phit[k*s.R+a]*conj(phit[k*s.R+a]);

        //Somando o resultado em uma matriz externa para média de ensemble.
        out->A[ROW][col]+=prob;
        col++;
    }

// Calculando os elementos fora da diagonal da matriz reduzida de A
for(k=0;k<s.A;k++)
    {
        for(l=k+1;l<s.A;l++)
{
prob=.0+.0*I;
for(a=0;a<s.R;a++)
    prob+=phit[k*s.R+a]*conj(phit[l*s.R+a]);

out->A[ROW][col]+=prob;
col++;
}
    }

//Elementos diagonais da matriz reduzida do reservatório
col=0;
for(k=0;k<s.R;k++)
    {
        prob=.0+.0*I;
        for(a=0;a<s.A;a++)
prob+=phit[a*s.R+k]*conj(phit[a*s.R+k]);

        out->R[ROW][col]+=prob;
        col++;
    }

//Elementos não-diagonais da matriz reduzida do reservatório
for(k=0;k<s.R;k++)
    {
        for(l=k+1;l<s.R;l++)

```

```

{
  prob=.0+.0*I;
  for(a=0;a<s.A;a++)
    prob+=phit[a*s.R+k]*conj(phit[a*s.R+1]);

  out->R[ROW][col]+=prob;
  col++;
}
}

```

Com os elementos calculados a partir do traço parcial, podemos analisar qualquer parâmetro ou observável que desejarmos: entropia, energia média, magnetização, etc. A opção de selecionar primeiramente os elementos diagonais está associada a facilidade em plotar os gráficos. Uma vez que estes são elementos consecutivos em um vetor, podemos simplesmente realizar um *for* dentro do Gnuplot<sup>5</sup> e termos todos os elementos diagonais em um gráfico.

---

<sup>5</sup><http://www.gnuplot.info/>



# Apêndice C

## Erro de ensemble e propagação

No capítulo 4 analisamos a necessidade do uso de ensemble de matrizes aleatórias de interação para a reprodução dos efeitos de decoerência quântica. O ideal seria que o número de repetições tendesse para o infinito, entretanto, do ponto de vista numérico, um ensemble infinito é computacionalmente “caro”. Desta forma, a pergunta que permanece é o quão grande deve ser este ensemble de matrizes aleatórias.

Como o tamanho deste ensemble está associado à estabilidade e suavidade dos elementos diagonais da matriz densidade reduzida de um determinado sistema em regime estacionário, tomamos que o ensemble é grande o suficiente quando o desvio padrão corrigido relativo médio é da ordem de  $10^{-3}$ . Em geral, o tamanho do ensemble depende do tamanho do sistema completo ( sistema + reservatório). Neste trabalho, o menor ensemble utilizado apresenta 2000 matrizes aleatórias, enquanto o maior apresenta 10000.

Para o caso de um sistema de 3 níveis estudados no capítulo 6 – sistemas diagonais – usamos, em geral, um ensemble de 2000 matrizes aleatórias. Utilizando um notebook com processador Intel i7 hyper-threading com clock de 3.3GHZ e 750% da capacidade do CPU, cada simulação de ensemble levou aproximadamente 45 ~ 50 minutos. Dado o custo/benefício e o objetivo principal deste trabalho – mostrar a termalização de sistemas com poucos níveis – um erro relativo médio de  $10^{-3}$  é bastante razoável e suficiente.

O desvio padrão corrigido relativo é definido por:

$$\bar{\sigma}_{\rho_k} = \frac{1}{\langle \rho_k \rangle} \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{l=1}^N [\rho_k(t_0 + l dt) - \langle \rho_k \rangle]^2}, \quad (\text{C.0.1})$$

onde  $\rho_k$  é um dos elementos diagonais da matriz densidade reduzida,  $t_0$  é um instante de tempo que marca o início do regime estacionário – geralmente tomamos como  $t_0$  como um instante qualquer a partir de onde não existem mais grandes variações de  $\rho_k$  no tempo –  $dt$  é o passo utilizado pelo programa,  $\langle \rho_k \rangle$  é o valor médio de  $\rho_k$  calculado a partir de  $t_0$  e  $N$  é o número total de pontos calculados depois de  $t_0$ .

Uma vez que temos o valor médio de equilíbrio e seu desvio padrão, podemos calcular como estes se propagam para o cálculo de energia média, entropia e temperatura espectral

de equilíbrio. Supondo um função genérica  $P(\rho_k)$ , com  $k = [0, d - 1]$  e  $d$  sendo o número níveis com energias diferentes, podemos expandir esta em série de Taylor em torno dos valores médios de equilíbrio de  $\rho_k$ , este definido por  $\bar{\rho}_k$ .

$$P(\rho_0, \dots, \rho_{d-1}) = \sum_{k_0} \dots \sum_{k_{d-1}} \left( \frac{\partial^{k_0 + \dots + k_{d-1}} P(\bar{\rho}_0, \dots, \bar{\rho}_{d-1})}{\partial \rho_0^{k_0} \dots \partial \rho_0^{k_{d-1}}} \right) \frac{(\rho_0 - \bar{\rho}_0)^{k_0} \dots (\rho_{d-1} - \bar{\rho}_{d-1})^{k_{d-1}}}{k_0! \dots k_{d-1}!} \quad (\text{C.0.2})$$

Como estamos garantindo que o desvio padrão é pequeno, temos que  $(\rho_k - \bar{\rho}_k)$  é pequeno. Sendo assim, iremos tratar apenas das contribuições lineares.

$$P(\rho_0, \dots, \rho_{d-1}) \approx P(\bar{\rho}_0, \dots, \bar{\rho}_{d-1}) + \sum_{k=0}^{d-1} \left( \frac{\partial P(\bar{\rho}_0, \dots, \bar{\rho}_{d-1})}{\partial \rho_k} \right) (\rho_k - \bar{\rho}_k) \quad (\text{C.0.3})$$

Desta forma, temos que o desvio da função  $P$  em relação àquela calculada utilizando os valores médios de  $\rho_k$  é dado por:

$$\Delta P \approx \sum_{k=0}^{d-1} \left( \frac{\partial P(\bar{\rho}_0, \dots, \bar{\rho}_{d-1})}{\partial \rho_k} \right) (\rho_k - \bar{\rho}_k). \quad (\text{C.0.4})$$

Uma vez que temos o erro associado para cada intervalo de tempo, podemos calcular o desvio padrão destes erros para, assim, termo como o erro dos elementos diagonais da matriz densidade reduzida do sistema em estudo é propagado para a função  $P$ . Temos:

$$\sigma_P^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N (\Delta P_n)^2, \quad (\text{C.0.5})$$

onde  $\sigma_P$  é o desvio padrão corrigido da função  $P$ ,  $N$  é o número total de ponto utilizados para a média e  $\Delta P_n$  é o erro associado ao intervalo ponto  $t_0 + ndt$ .

Mais uma vez, estamos interessados em termos de ordem linear do desvio padrão, por conseguinte, descartamos termos de ordem cúbica ou superior no cálculo da variância corrigida.

$$\sigma_P^2 \approx \sum_{k=0}^{d-1} \left( \frac{\partial P(\bar{\rho}_0, \dots, \bar{\rho}_{d-1})}{\partial \rho_k} \right)^2 \sigma_{\rho_k}^2 \quad (\text{C.0.6})$$

Portanto, o erro propagado para a função  $P$  é dado por:

$$\sigma_P = \sqrt{\left( \frac{\partial P(\bar{\rho}_0, \dots, \bar{\rho}_{d-1})}{\partial \rho_0} \right)^2 \sigma_{\rho_0}^2 + \dots + \left( \frac{\partial P(\bar{\rho}_0, \dots, \bar{\rho}_{d-1})}{\partial \rho_{d-1}} \right)^2 \sigma_{\rho_{d-1}}^2}. \quad (\text{C.0.7})$$

Agora que temos a receita de como calcular o erro propagado a partir das estimativas das probabilidades de cada nível do sistema, podemos estimar o erro propagado no cálculo

da energia média, da entropia e da temperatura espectral.

Supondo que o Hamiltoniano do sistema está em sua forma diagonal – no equilíbrio existe uma base capaz de diagonalizar tanto o Hamiltoniano quando a matriz densidade de probabilidades do sistema – temos que a energia média pode ser obtida a partir da equação:

$$\langle E \rangle = \sum_k E_k \rho_k \quad (\text{C.0.8})$$

onde  $E_k$  é a energia de cada nível. Neste caso, não precisamos nos preocupar se existem níveis degenerados. A derivada parcial de  $\langle E \rangle$  em relação um  $\rho_l$  qualquer é dada por:

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \rho_l} = E_l. \quad (\text{C.0.9})$$

Desta forma, temos que o erro propagado é simplesmente dado por:

$$\sigma_{\langle E \rangle}^2 = \sum_k E_k^2 \sigma_{\rho_k}^2. \quad (\text{C.0.10})$$

Seguindo o mesmo método, podemos calcular o erro propagada para a entropia,

$$S = - \sum_k \rho_k \log(\rho_k). \quad (\text{C.0.11})$$

Como a soma é linear em níveis, isto é, não existe cruzamento das probabilidades de níveis distintos, as derivadas parciais são obtidas facilmente:

$$\frac{\partial S}{\partial \rho_l} = 1 + \log(\rho_l). \quad (\text{C.0.12})$$

Sendo assim, temos que o erro propagado para a entropia é dado por:

$$\sigma_S^2 = \sum_k [1 + \log(\rho_k)]^2 \sigma_{\rho_k}^2. \quad (\text{C.0.13})$$

Por outro lado, o cálculo de propagação de erro para a temperatura espectral é um pouco mais complexo. Desta vez temos mistura de níveis em mais de um termo da soma e a normalização insere diferenças para a derivada parcial dos níveis fundamental e mais energético. A temperatura espectral é definida por:

$$\beta_s = \left(1 - \frac{\rho_0 + \rho_N}{2}\right)^{-1} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{\rho_k + \rho_{k+1}}{2} \frac{\log \rho_k + \log g_{k+1} - \log \rho_{k+1} - \log g_k}{E_{k+1} - E_k}, \quad (\text{C.0.14})$$

como analisado no capítulo 5.

Enquanto a derivada parcial de  $\beta_s$  com relação a  $\rho_0$  é dada por:

$$\frac{\partial \beta_s}{\partial \rho_0} = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\rho_0 + \rho_N}{2} \right)^{-1} \left\{ \beta_s + \frac{1}{E_1 - E_0} \left[ \log \left( \frac{\rho_0 g_1}{\rho_1 g_0} \right) + \frac{\rho_0 + \rho_1}{\rho_0} \right] \right\}, \quad (\text{C.0.15})$$

temos que a derivada parcial com relação a  $\rho_N$  é dada por:

$$\frac{\partial \beta_s}{\partial \rho_N} = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\rho_0 + \rho_N}{2} \right)^{-1} \left\{ \beta_s + \frac{1}{E_N - E_{N-1}} \left[ \log \left( \frac{\rho_{N-1} g_N}{\rho_N g_{N-1}} \right) - \frac{\rho_N + \rho_{N-1}}{\rho_N} \right] \right\}. \quad (\text{C.0.16})$$

E, para qualquer outro nível, temos:

$$\frac{\partial \beta_s}{\partial \rho_l} = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\rho_0 + \rho_N}{2} \right)^{-1} \left\{ \frac{1}{E_l - E_{l-1}} \left[ \log \left( \frac{\rho_{l-1} g_l}{\rho_l g_{l-1}} \right) - \frac{\rho_l + \rho_{l-1}}{\rho_l} \right] + \frac{1}{E_{l+1} - E_l} \left[ \log \left( \frac{\rho_l g_{l+1}}{\rho_{l+1} g_l} \right) + \frac{\rho_l + \rho_{l+1}}{\rho_l} \right] \right\}. \quad (\text{C.0.17})$$

Substituindo os valores médios de  $\rho_k$  nas parciais acima, podemos calcular o erro propagado para a temperatura espectral através da equação (C.0.7).