



Universidade Federal da Paraíba  
Centro de Ciências Exatas e da Natureza  
Programa de Pós-Graduação Stricto Sensu em Física

Acson Clementino da Silva

**Estudo da primeira lei da termodinâmica para um sistema quântico de dois níveis  
acoplado com um ambiente térmico**

João Pessoa - PB  
Fevereiro de 2023

Acson Clementino da Silva

**Estudo da primeira lei da termodinâmica para um sistema quântico de dois níveis  
acoplado com um ambiente térmico**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da UFPB (área de concentração: Física da Matéria Condensada), como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de Mestre em Física.

Orientador: Bertúlio de Lima Bernardo

João Pessoa - PB  
Fevereiro de 2023

**Catálogo na publicação**  
**Seção de Catalogação e Classificação**

S586e Silva, Acson Clementino da.

Estudo da primeira lei da termodinâmica para um sistema quântico de dois níveis acoplado com um ambiente térmico / Acson Clementino da Silva. - João Pessoa, 2023.

63 f. : il.

Orientação: Bertúlio de Lima Bernardo.  
Dissertação (Mestrado) - UFPB/CCEN.

1. Termodinâmica quântica. 2. Sistemas quânticos abertos. 3. Energia coerente. I. Bernardo, Bertúlio de Lima. II. Título.

UFPB/BC

CDU 536.7:530.145(043)

Ata da Sessão Pública da Defesa de dissertação de **Mestrado** do aluno **Acson Clementino da Silva**, candidato ao Título de Mestre em Física na Área de Concentração Física da Matéria Condensada.

Aos vinte e oito dias do mês de fevereiro do ano de dois mil e vinte e três, às 10:00, nas dependências do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal da Paraíba, reuniram-se os membros da Banca Examinadora constituída para avaliar a dissertação de Mestrado, na área de Física da Matéria Condensada, de **Acson Clementino da Silva**. A banca foi composta pelos(as) professores(as) doutores(as): Bertúlio de Lima Bernardo (UFPB), orientador e presidente da banca examinadora, Fábio Leal de Melo Dahia (UFPB) e Moises Porfirio Rojas Levya (UFLA). Dando início aos trabalhos, o Prof. Bertúlio de Lima Bernardo comunicou aos presentes a finalidade da reunião. A seguir, passou a palavra para o candidato para que o mesmo fizesse, oralmente, a exposição da pesquisa de dissertação intitulada “*Estudo da primeira lei da termodinâmica para um sistema quântico de dois níveis acoplado com um ambiente térmico*”. Concluída a exposição, o candidato foi arguido pela Banca Examinadora, que emitiu o parecer “**aprovado**”. Assim sendo, deve a Universidade Federal da Paraíba expedir o respectivo diploma de Mestre em Física na forma da lei. E para constar, Danilo Wilson Lemos Menezes, Técnico em Assuntos Educacionais, redigiu a presente ata que vai assinada pelos membros da Banca Examinadora. João Pessoa, Paraíba, **28 de fevereiro de 2023**.



Documento assinado digitalmente  
BERTULIO DE LIMA BERNARDO  
Data: 28/02/2023 12:36:22-0300  
Verifique em <https://verificador.iti.br>

Prof. Dr. Bertúlio de Lima Bernardo  
Orientador

Prof. Dr. Fábio Leal de Melo Dahia  
PPGF/UFPB

Prof. Dr. Moises Porfirio Rojas Levya  
UFLA

## **AGRADECIMENTOS**

A minha família, especialmente meus pais, Arioneide e Alexandro, pelo apoio, suporte e compreensão durante todos esses anos ausentes.

A minha namorada Eduarda, por estar ao meu lado em todos os momentos, e por ter me incentivado a me manter firme.

Ao professor Bertúlio, pela atenção, dedicação e paciência que demonstrou por mim durante esses anos.

Ao grupo de Teoria Quântica, pelo acolhimento e conhecimento compartilhado durante todas as reuniões.

Aos meus amigos, em especial Jansen, pela parceria, apoio e trocas de conhecimentos.

À Universidade Federal da Paraíba e a todos os professores do departamento de Física, por todo o conhecimento.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pelo suporte financeiro.

## RESUMO

Nesta dissertação é apresentada uma revisão dos conceitos da mecânica quântica, tratando de sistemas de dois níveis (qubits) como parte de um sistema composto, com a utilização do formalismo de matriz densidade. Utilizando o método de operadores de Kraus, estudamos a evolução de sistemas sujeitos a ruídos causados pelo ambiente, como no caso do canal de amortecimento de amplitude generalizado. Para que fosse possível fazer uma análise das informações obtidas, foi feita uma revisão geral sobre as entropias de Shannon e de von Neumann, além das suas propriedades. Também é apresentada uma visão quântica da termodinâmica, dando ênfase à primeira e segunda leis da termodinâmica clássica. O estudo se concentra em estudar os processos energéticos que se apresentam quando um qubit está acoplado a um ambiente térmico. A evolução do sistema composto é descrita através de uma transformação unitária, e as propriedades termodinâmicas do qubit são analisadas através de uma definição mais geral da primeira lei da termodinâmica quântica em que o papel da coerência quântica é destacado.

**Palavras-chave:** Sistemas quânticos abertos; termodinâmica quântica; energia coerente.

## ABSTRACT

In this dissertation, a review of the concepts of quantum mechanics is presented, dealing with two-level systems (qubits) as part of a composite system, using the density matrix formalism. Using the method of Kraus operators, we study the evolution of systems subject to noise caused by the environment, such as in the case of the generalized amplitude damping channel. In order to be able to analyze the information obtained, a general review of Shannon and von Neumann entropies and their properties is made. A quantum view of thermodynamics is also presented, emphasizing the first and second laws of classical thermodynamics. The study focuses on studying the energetic processes that occur when a qubit is coupled to a thermal environment. The evolution of the composite system is described through a unitary transformation, and the thermodynamic properties of the qubit are analyzed through a more general definition of the first law of quantum thermodynamics, in which the role of quantum coherence is highlighted.

**Keywords:** Open quantum systems; quantum thermodynamics; coherent energy.

## LISTA DE FIGURAS

1	Representação de um sistema quântico $\mathcal{S}$ interagindo com um ambiente $\mathcal{E}$ . . . .	13
2	Esfera de Bloch . . . . .	18
3	Representação de um sistema quântico aberto e fechado . . . . .	20
4	Representação geométrica do efeito do canal bit flip . . . . .	23
5	Representação geométrica do efeito do canal phase flip . . . . .	25
6	Representação geométrica do efeito do canal bit-phase flip . . . . .	26
7	Representação geométrica do efeito do canal de despolarização . . . . .	28
8	Representação geométrica do efeito do canal de amortecimento de amplitude .	30
9	Diagrama de Venn dos quantificadores de informação . . . . .	35
10	Variedade termodinâmica . . . . .	38
11	Diagrama de um sistema quântico multi-nível . . . . .	41
12	Representação gráfica do modelo físico . . . . .	49
13	Evolução das propriedades termodinâmica do sistema e ambiente . . . . .	54
14	Evolução da entropia e norma da coerência . . . . .	55
15	Negatividade e concorrência em função do tempo . . . . .	55

# Sumário

<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>6</b>
<b>I Elementos da teoria quântica</b>	<b>8</b>
<b>1.1 Os postulados da mecânica quântica</b>	<b>8</b>
1.1.1 Primeiro Postulado . . . . .	8
1.1.2 Segundo Postulado . . . . .	8
1.1.3 Terceiro Postulado . . . . .	9
1.1.4 Quarto Postulado . . . . .	9
1.1.5 Quinto Postulado . . . . .	10
1.1.6 Sexto Postulado . . . . .	10
<b>1.2 Sistemas de dois níveis</b>	<b>10</b>
<b>1.3 Operador densidade</b>	<b>11</b>
<b>1.4 Sistemas Quânticos Abertos</b>	<b>13</b>
1.4.1 Coerência e Decoerência . . . . .	14
1.4.2 Emaranhamento . . . . .	14
1.4.3 Negatividade e Concorrência . . . . .	15
<b>1.5 O Qubit</b>	<b>16</b>
<b>1.6 Operações quânticas</b>	<b>19</b>
1.6.1 Operadores de Kraus . . . . .	20
1.6.2 Canais bit flip, phase flip e bit-phase flip . . . . .	22
1.6.3 Canal de despolarização . . . . .	26
1.6.4 Canal de amortecimento de amplitude . . . . .	28
<b>1.7 Entropia e informação</b>	<b>30</b>
1.7.1 Entropia de Shannon . . . . .	30
1.7.2 Entropia de von Neumann . . . . .	32
1.7.3 Entropia relativa, entropia condicional e informação mútua . . . . .	33
<b>II Termodinâmica clássica e quântica</b>	<b>37</b>
<b>2.1 Variedade termodinâmica e processos reversíveis</b>	<b>37</b>
<b>2.2 Primeira lei da termodinâmica clássica</b>	<b>38</b>
<b>2.3 Segunda lei da termodinâmica clássica</b>	<b>39</b>

<b>2.4 Primeira lei da termodinâmica quântica</b>	<b>41</b>
2.4.1 A primeira lei a partir de definição clássica de calor . . . . .	44
2.4.2 O papel da coerência . . . . .	45
<b>III Sistema quântico acoplado com o ambiente</b>	<b>48</b>
<b>3.1 Regime de acoplamento</b>	<b>48</b>
<b>3.2 Modelo físico</b>	<b>48</b>
3.2.1 Termodinâmica do modelo . . . . .	52
<b>IV Conclusão</b>	<b>57</b>
<b>Conclusão</b>	<b>57</b>
<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>58</b>

## INTRODUÇÃO

A Informação Quântica é um campo de estudo que investiga como os princípios da Mecânica Quântica se relacionam com a teoria da informação. Desde o surgimento da mecânica quântica proposto por Max Planck em 1900 (PLANCK, 1900), tem havido muitos progressos na compreensão de como a natureza quântica impacta a informação e a comunicação.

O princípio da incerteza de Heisenberg (HEISENBERG, 1927), uma das principais descobertas da Teoria Quântica, demonstra que não é possível medir simultaneamente, e com precisão, algumas propriedades quânticas, que são incompatíveis, como, por exemplo, posição e momento em um determinado eixo. Isso tem implicações significativas para a segurança em sistemas de comunicação e criptografia quântica (GISIN et al., 2002). Outra descoberta importante foi o fenômeno da decoerência (ZUREK, 1981), que é a perda irreversível de informação quântica devido à interação do sistema com o ambiente. Isso tem implicações importantes para a compreensão da transição do mundo quântico para o mundo clássico. Além disso, o emaranhamento quântico (STRELTSOV; ADESSO; PLENIO, 2017) é outro fenômeno que tem recebido muita atenção recentemente, pois tem implicações para a comunicação e computação quântica. Um dos principais livros-texto nesta área é o livro de Nielsen e Chuang "Quantum Computation and Quantum Information" (NIELSEN; CHUANG, 2002). Outros trabalhos importantes incluem "Quantum Information Theory" de Wilde (WILDE, 2013) e "The role of relative entropy in quantum information theory" de Vedral (VEDRAL, 2002). Esses trabalhos apresentam uma visão geral dos princípios fundamentais da informação quântica e suas aplicações em áreas como codificação de informação, teoria da informação quântica, processamento de informação quântica e comunicação quântica.

Por outro lado, a termodinâmica é um ramo da física que se dedica a estudar as relações entre calor, trabalho e energia. Ela foi desenvolvida no século XIX por cientistas como Sadi Carnot, James Joule e Lord Kelvin e se baseia em quatro leis fundamentais que descrevem como a energia e a entropia de um sistema se comportam e como esses dois conceitos estão relacionados. A lei zero afirma que se dois sistemas estão em equilíbrio térmico com um terceiro sistema, então eles estão em equilíbrio térmico entre si (DEFFNER; CAMPBELL, 2019). A primeira lei, também conhecida como princípio da conservação de energia (JOULE, 1850), descreve as formas com que um sistema pode trocar energia com o meio externo. A segunda lei, que estabelece um sentido temporal para os processos físicos, afirma que a entropia de um sistema tende a aumentar com o tempo. A terceira lei, afirma que a entropia de um sistema é nula se o mesmo atinge o zero absoluto. A termodinâmica tem muitas aplicações em áreas como engenharia, física, química e biologia, e é fundamental para entender como as máquinas térmicas funcionam e como a energia é produzida e utilizada.

A termodinâmica quântica relaciona princípios da mecânica quântica com os conceitos de calor, trabalho e energia. Enquanto a termodinâmica clássica se baseia em observações das quais são inferidas suas leis, e a partir daí descrever o comportamento de grandes sistemas de partículas, a termodinâmica quântica descreve o comportamento de sistemas

quânticos individuais, onde os efeitos da interferência quântica são relevantes. A entropia, tradicionalmente entendida como uma medida da desordem de um sistema na termodinâmica clássica, é redefinida na termodinâmica quântica como uma medida da incerteza sobre qual estado quântico descreve o sistema. Isso tem implicações importantes para a compreensão de fenômenos como o emaranhamento quântico e a decoerência.

Este estudo tem como objetivo revisar alguns conceitos da termodinâmica, da teoria da informação e da mecânica quântica, a fim de analisar os processos energéticos em um sistema quântico de dois níveis interagindo com um ambiente térmico. Faremos uma discussão aprofundada da primeira lei da termodinâmica quântica (BERNARDO, 2020) em que destacamos o papel da coerência quântica em processos de troca de energia em nível atômico (BERNARDO, 2021).

# Capítulo I

## Elementos da teoria quântica

### 1.1 Os postulados da mecânica quântica

Esta seção tem como objetivo descrever os postulados da mecânica quântica, que estabelecem uma conexão matemática com a realidade física e fornecem ferramentas para trabalhar com sistemas quânticos. Os resultados deste trabalho fazem uso da descrição da mecânica quântica por meio da notação de Dirac e da matriz densidade. Por isso, os postulados serão enunciados com esse formalismo.

#### 1.1.1 Primeiro Postulado

1.1e 1 Um sistema físico é completamente descrito por um vetor de estado **ket**  $|\psi\rangle$  no espaço de Hilbert, um espaço vetorial complexo dotado de produto interno. O complexo conjugado de um **ket** pertence ao espaço dual, sendo representado por um **bra**  $\langle\psi|$ .

A consequência de poder representar um estado por um vetor é a possibilidade de reescrevê-lo como uma superposição estados. Então, considerando um conjunto  $\{|a_n\rangle\}$  que forma uma base em um espaço de Hilbert, qualquer vetor deste espaço pode ser escrito como uma combinação linear dos vetores da base

$$|\psi\rangle = \sum_n \alpha_n |a_n\rangle, \quad (1.1)$$

onde  $\alpha_n$  são números complexos e devem satisfazer à condição de normalização

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_n |\alpha_n|^2 = 1. \quad (1.2)$$

Apesar da estranheza de poder considerar um estado físico como uma superposição quântica entre dois ou mais estados, somos levados a isso devido a resultados experimentais, como o do experimento da fenda dupla (JAFFE, 1996)

#### 1.1.2 Segundo Postulado

Todo observável atribuído a um sistema físico é descrito por um operador hermitiano que atua no espaço de Hilbert que descreve o sistema. A hermiticidade é garantida quando um operador arbitrário  $\hat{A}$  respeita a seguinte relação

$$\hat{A}^\dagger = (\hat{A}^*)^T = \hat{A}. \quad (1.3)$$

Um observável possui autovalores, que são os possíveis resultados da medida, e autovetores (ou autoestados), que são os estados colapsados após uma medida cuja resultado é o autovalor associado. Por convenção, um operador  $\hat{A}$  atua em um ket  $|a_n\rangle$  pela esquerda.

$$\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle, \quad (1.4)$$

onde  $|a_n\rangle$  são os autoestados e  $a_n$  são os autovalores do operador.

### 1.1.3 Terceiro Postulado

Os únicos resultados possíveis da medição de um observável  $\hat{A}$  são os autovalores do operador correspondente.

Diversos experimentos, como por exemplo o das linhas espectrais observadas na radiação de um tubo de gás de hidrogênio quente, indicam que a medida de energia assume valores discretos, e é justamente essa a origem da palavra "*quantum*". A forma da Eq. (1.4) mostra que os observáveis possuem resultados de medidas discretos.

Para que de fato os autovalores de um observável representem os possíveis resultados de uma medida, eles devem ser números reais, e isso faz parte da característica de um operador hermitiano. Além disso, seus autoestados são ortogonais e formam uma base, o que permite a escrita de qualquer estado em termos dos autoestados do observável.

### 1.1.4 Quarto Postulado

Quando é realizada uma medida de  $\hat{A}$  em  $|\psi\rangle$ , a probabilidade de obter um autovalor  $a_n$  não degenerado é de

$$P(a_n) = |\langle a_n|\psi\rangle|^2. \quad (1.5)$$

No caso em que dois, ou mais, autovetores linearmente independentes de  $\hat{A}$  compartilham um mesmo autovalor, dizemos que esses autovetores são **degenerados** (SAKURAI; NAPOLITANO, 2013).

O grau de degenerescência  $g_n$  é a quantidade de estados que compartilham o mesmo autovalor  $a_n$ . Por exemplo, se os autoestados  $|a_1\rangle$ ,  $|a_2\rangle$  e  $|a_3\rangle$  possuem o mesmo autoestado  $a_1$ , então o grau de degenerescência é  $g_1 = 3$ . Logo, para estados degenerados, a probabilidade de obter um autovalor  $a_n$  com um grau de degenerescência  $g_n$  é dada por

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle a_i|\psi\rangle|^2. \quad (1.6)$$

### 1.1.5 Quinto Postulado

Imediatamente após a medição em um observável arbitrário  $\hat{A}$  resultar em um autovalor  $a_n$ , o estado do sistema colapsa no autoestado  $|a_n\rangle$  normalizado.

Também conhecido como "colapso da função de onda", este fenômeno é que gera estranheza quando pensamos classicamente. Ao realizarmos uma medida em um sistema quântico, o estado do sistema estudado se altera. Já na mecânica clássica uma medição não afeta o estado do sistema, como por exemplo, a altura de uma porta não se altera após a realização de uma medida utilizando uma fita métrica.

### 1.1.6 Sexto Postulado

A evolução temporal de um estado quântico é descrita por uma transformação unitária

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle, \quad (1.7)$$

onde  $\hat{U}$  é o operador evolução temporal e este preserva a normalização do estado.

Podemos obter o operador evolução temporal solucionando a equação de Schrödinger dependente do tempo,

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle. \quad (1.8)$$

Em situações onde o hamiltoniano não depende explicitamente do tempo, podemos escrever  $\hat{U}(t_0, t)$  na forma

$$\hat{U}(t_0, t) = \exp \left[ \frac{-i\hat{H}(t - t_0)}{\hbar} \right], \quad (1.9)$$

que é a solução da Eq. de Schrödinger considerando  $\hat{H}$  constante.

## 1.2 Sistemas de dois níveis

Os sistemas quânticos de dois níveis são modelos simplificados que podem ser utilizados para descrever uma grande variedade de fenômenos quânticos. Eles são conhecidos como sistemas de dois níveis porque podem ser representados por um espaço de estado de dois níveis, ou seja, um sistema que pode estar em uma das duas configurações possíveis.

Um exemplo de sistema quântico de dois níveis é a projeção de spin. O spin de uma partícula é uma propriedade intrínseca que se comporta como um momento angular quântico, e pode assumir valores discretos. Partículas com spin  $\frac{1}{2}$ , como os elétrons, possuem duas opções possíveis para o spin: "para cima" ou "para baixo" em relação a uma direção determinada, que podem ser representadas por dois estados distintos. O observável utilizado para descrever uma partícula de spin  $\frac{1}{2}$  é o  $\hat{S}_n$ , utilizado para medir a componente do spin em uma determinada

direção  $\hat{n}$ . Apenas dois resultados podem ser extraídos a partir de uma medida de  $\hat{S}_n$  em uma partícula de spin  $\frac{1}{2}$ , estes são  $\pm \frac{\hbar}{2}$ .

Os sistemas quânticos de dois níveis são considerados importantes porque possibilitam o estudo de muitos aspectos fundamentais da mecânica quântica, como a superposição, a interferência e o entrelaçamento, de maneira simples e direta. Além disso, eles têm aplicações práticas em campos como a criptografia quântica e a informação quântica.

### 1.3 Operador densidade

Até o momento utilizamos um ket  $|\psi\rangle$  para descrever o estado de um sistema, mas podemos nos deparar com situações onde o estado do sistema não seja exatamente conhecido, mas tenha possibilidades de estar dentre alguns estados conhecidos  $|\psi_i\rangle$ . Note que a ignorância relativa ao estado neste caso é clássica, ou seja, não se trata de uma superposição quântica, e sim algum procedimento externo que colocou em dúvida o real estado do sistema, como por exemplo um equipamento experimental defeituoso. Nesses casos, utilizamos o chamado operador densidade, que também podemos utilizar para representar um estado totalmente conhecido, ou puro, da seguinte forma

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (1.10)$$

No caso de termos uma mistura estatística de estados, chamamos o estado geral de misto, e o representamos como

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (1.11)$$

onde  $p_i$  são as probabilidades (clássicas) de se encontrar os estados  $|\psi_i\rangle$  que compõe a mistura.

Apesar das equações (1.10) e (1.11) serem formas de escrever o operador densidade, onde podemos claramente distinguir um estado puro de um estado misto, podem haver outras forma de escrita que coloca em dúvida sobre a pureza do estado. Então, definimos como pureza de um operador densidade  $\rho$  a seguinte relação

$$P = \text{Tr}(\rho^2), \quad (1.12)$$

sendo que, para estados puros  $P = 1$  e para estados mistos  $P < 1$ .

Os operadores densidade devem possuir as seguintes propriedades:

- O traço de  $\rho$  deve ser igual a um, ou seja,  $\text{Tr}(\rho) = 1$ .

Podemos observar a propriedade acima considerando  $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ , então

$$\begin{aligned}\text{Tr}(\rho) &= \text{Tr}\left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\right) \\ &= \sum_i p_i \text{Tr}(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) \\ &= \sum_i p_i = 1.\end{aligned}\tag{1.13}$$

- $\rho$  é um operador positivo.

Tendo um estado arbitrário  $|\phi\rangle$ , temos

$$\begin{aligned}\langle\phi|\rho|\phi\rangle &= \sum_i p_i \langle\phi|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\phi\rangle \\ &= \sum_i p_i |\langle\phi|\psi_i\rangle|^2 \geq 0,\end{aligned}\tag{1.14}$$

então, de fato,  $\rho$  é um operador positivo.

- $\rho$  é um operador hermitiano, ou seja,  $\rho = \rho^\dagger$ .

Podemos obter o valor médio de um observável através do formalismo de operadores, seja o estado puro ou misto. Para um estado puro, como o da Eq. (1.10) escrito na base  $\{|a_n\rangle\}$ , o valor médio de  $\hat{A}$  será

$$\begin{aligned}\langle\hat{A}\rangle &= \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}\left[\sum_n \alpha_n |a_n\rangle\right] = \left[\sum_m \alpha_m^* \langle a_m|\right] \hat{A} \left[\sum_n \alpha_n |a_n\rangle\right] \\ &= \sum_m \sum_n \alpha_m^* \alpha_n \langle a_m|\hat{A}|a_n\rangle = \sum_m \sum_n \alpha_m^* \alpha_n A_{m,n},\end{aligned}\tag{1.15}$$

onde  $A_{m,n} = \langle a_m|\hat{A}|a_n\rangle$  são os elementos do operador  $\hat{A}$ . Além disso, podemos identificar o elemento  $\alpha_m^* \alpha_n$  como  $\langle a_n|\psi\rangle\langle\psi|a_m\rangle = \langle a_n|\rho|a_m\rangle$ . Dessa forma temos

$$\begin{aligned}\langle\hat{A}\rangle &= \sum_m \sum_n \alpha_m^* \alpha_n A_{m,n} = \sum_m \sum_n \langle a_n|\rho|a_m\rangle \langle a_m|\hat{A}|a_n\rangle \\ &= \sum_n \langle a_n|\rho\hat{A}|a_n\rangle\end{aligned}\tag{1.16}$$

$$\implies \langle\hat{A}\rangle = \text{Tr}[\rho\hat{A}],\tag{1.17}$$

onde a Eq. (1.17) é válida para estados puros ou mistos.

## 1.4 Sistemas Quânticos Abertos

Durante os estudos de fenômenos físicos, é conveniente isolar o sistema para que perturbações indesejadas sejam minimizadas. Dessa forma, o experimento é considerado satisfatório se nos fornece uma maior quantidade de informação com um mínimo impacto de ruídos do ambiente.

Essa concepção de isolar um sistema para se estudar suas propriedades também foi adotada na mecânica quântica e, a princípio, os efeitos quânticos observados nos primeiros experimentos eram passíveis de observações, pois os sistemas estudados não interagem com o ambiente de forma significativa (SCHLOSSHAUER, 2007). Porém, o fato é que todo sistema possui algum grau de abertura, e a depender do modo com que o ambiente afeta o sistema, devemos considerar o ambiente  $\mathcal{E}$  e o sistema  $\mathcal{S}$  de interesse como um sistema maior  $\mathcal{SE}$  (Fig.1).

Um estado composto puro pode ser descrito por um vetor  $|\psi\rangle$ , mas um subsistema geralmente não pode. Por conta disso se motivou o formalismo de operador densidade (ou matriz densidade), visto com mais detalhes na seção 1.3.

Figura 1: Representação de um sistema quântico  $\mathcal{S}$  interagindo com um ambiente  $\mathcal{E}$ .

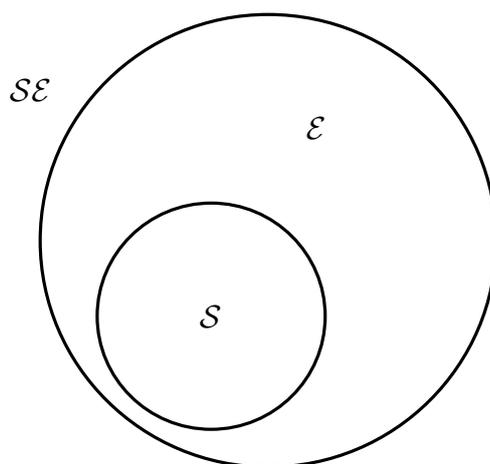


Ilustração de um sistema quântico aberto. Sendo um sistema  $\mathcal{S}$  interagindo com o ambiente  $\mathcal{E}$ , podemos considerar ambos como um sistema fechado maior  $\mathcal{SE}$ . **Fonte:** Autoria própria

Além das matrizes densidade mencionadas anteriormente, existem as matrizes densidade reduzidas, que são importantes para descrever a forma como a decoerência ocorre (SCHLOSSHAUER, 2007). A matriz densidade reduzida é uma matriz que descreve o estado de um sistema quântico dividido em duas partes, geralmente um sistema  $\mathcal{S}$  e seu ambiente  $\mathcal{E}$ . Suponha que o observador só pode obter informações do sistema  $\mathcal{S}$ , mas não do ambiente  $\mathcal{E}$ . Portanto, todo o conhecimento sobre o estado do sistema composto deve ser derivado das medições realizadas no sistema  $\mathcal{S}$ . A matriz que contém todas as estatísticas de medições que podem ser extraídas do sistema  $\mathcal{S}$  é a matriz densidade reduzida, que é obtida através da operação de traço parcial da matriz densidade do sistema total  $\rho$ , que descreve o estado completo do sistema, como na Eq. (1.18) (SCHLOSSHAUER, 2007).

$$\rho_S(t) = \sum_n \langle e_n | \hat{U} \rho \hat{U}^\dagger | e_n \rangle = \text{Tr}_E \{ \hat{U} \rho \hat{U}^\dagger \}. \quad (1.18)$$

Neste caso, o sistema composto  $\mathcal{SE}$  é fechado e possui uma evolução unitária. A evolução unitária de sistemas quânticos fechados é conhecida e pode ser descrita pelo operador de evolução temporal  $\hat{U}$ , que atua no operador densidade do sistema composto  $\rho$ . Portanto, o operador de densidade  $\rho(t)$  é dado por

$$\rho(t) = \hat{U} \rho \hat{U}^\dagger = \hat{U} (\rho_S \otimes \rho_E) \hat{U}^\dagger. \quad (1.19)$$

### 1.4.1 Coerência e Decoerência

Sabemos que todos os sistemas interagem com o meio ambiente ao seu redor, e essa interação faz com que estes se correlacionem e transfira informações do sistema para o ambiente de forma irreversível. Com isso, o sistema estudado perde sua coerência com o tempo, tendendo para um estado misto. Conhecemos esse processo de perda de coerência como *decoerência*, sendo este um obstáculo para o processamento de informação com a utilização de portas lógicas quânticas (NIELSEN; CHUANG, 2002).

O formalismo utilizado para o estudo da decoerência é a teoria de sistemas quânticos abertos. Este formalismo considera as interações do sistema de interesse,  $S$ , com o ambiente,  $\mathcal{E}$ , de tal forma que o comportamento irreversível do sistema seja contemplado. Podemos escrever o hamiltoniano geral que reproduz um sistema acoplado ao ambiente como

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_E + \hat{H}_{SE}, \quad (1.20)$$

onde os operadores  $\hat{H}_S$  e  $\hat{H}_E$  são os hamiltonianos do sistema e ambiente, respectivamente, e  $\hat{H}_{SE}$  é o hamiltoniano de interação.

O sistema quântico é geral, podendo ser fótons, projeção de spins, polarização da luz, ou níveis de energia atômico. E o ambiente também pode ser dado por qualquer sistema que acople com o sistema quântico a ser estudado.

### 1.4.2 Emaranhamento

Um sistema composto  $|\psi_{AB}\rangle$ , formado por dois sistemas menores, pode ser escrito como um produto tensorial entre os estados puros de  $\mathcal{H}_A$  e  $\mathcal{H}_B$  (PRESKILL, 1998)

$$|\psi_{AB}\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle, \quad (1.21)$$

sendo suas matrizes densidade reduzidas puras, ou seja,  $\rho_A = \text{Tr}_B(\rho) = |\psi_A\rangle\langle\psi_A|$  e  $\rho_B = \text{Tr}_A(\rho) = |\psi_B\rangle\langle\psi_B|$ . Um estado que não pode ser escrito como a Eq. (1.21) é dito emaranhado (ou não separável). Sistemas quânticos emaranhados manifestam correlações quânticas que podem ser atestadas a partir dos resultados de medidas feitas em suas partes individualmente.

Uma das mais famosas manifestações não clássicas dos sistemas emaranhados é a capacidade de violar as chamadas desigualdades de Bell (BELL, 1964).

Este fenômeno, que trata de características não-locais, é observado apenas no universo quântico, não havendo nenhum análogo clássico. O fato de não podermos escrever o estado emaranhado na forma de produto tensorial implica dizer que não podemos fazer medidas sobre uma parte sem afetar a outra, e esse fato independe da distância física entre as duas partes (característica não-local). Quando temos estados mistos para dois sistemas de dois níveis, ou seja, uma mistura estatística de estados puros, podemos mensurar o emaranhamento utilizando a negatividade.

### 1.4.3 Negatividade e Concorrência

Quantificar o emaranhamento para se compreender melhor suas interações são algo importante para o campo da teoria da informação quântica, já que sistemas emaranhados são fundamentais na distribuição de chaves quânticas, codificação superdensa, teletransporte quântico e correção de erros quânticos (WERNER; WOLF, 2001). Para qualquer sistema bipartido em estado puro, é razoável definir o emaranhamento do sistema como a entropia de von Neumann para um operador densidade reduzido (como, por exemplo,  $S(\rho_S) = -\text{Tr}(\rho_S \ln(\rho_S))$ ), não importando qual subsistema é traçado, o resultado é o mesmo para qualquer um dos casos (BENNETT et al., 1996). No entanto, a entropia de emaranhamento não dá informações sobre o emaranhamento entre duas partes  $\rho_S$  e  $\rho_E$ . A informação mútua  $I(S : E) = S(\rho_S) + S(\rho_E) - S(\rho_{SE})$  mensura as correlações entre as duas partes, mas fornece apenas um limite superior do emaranhamento entre elas (CALABRESE; CARDY; TONNI, 2012).

Para se entender melhor o emaranhamento devemos introduzir uma medida computável baseada na norma do traço da matriz parcial transposta  $\rho_S$  do estado composto  $\rho$  (VIDAL; WERNER, 2002). Para um estado emaranhado bipartido com dois qubits  $|\psi_{SE}\rangle$  cuja matriz densidade é  $\rho = |\psi_{SE}\rangle\langle\psi_{SE}|$ , temos que a negatividade é dada por

$$\mathcal{N}(\rho) \equiv \frac{\|\rho^{Ts}\| - 1}{2}, \quad (1.22)$$

onde  $\|\rho^{Ts}\| = \|(T_S \otimes I_E)(\rho)\|$  é a norma da matriz densidade transposta parcial, sendo a norma de um operador arbitrário  $\hat{A}$  dada por (ZYCZKOWSKI et al., 1998)

$$\|\hat{A}\| = \sqrt{\text{Tr}(\hat{A}^\dagger \hat{A})}. \quad (1.23)$$

A Eq. (1.22) corresponde ao valor absoluto da soma dos autovalores negativos de  $\rho^{Ts}$  e que se anula para estados não emaranhados. Assim, também podemos rescrevê-la em termos dos autovalores de  $\rho^{Ts}$ ,

$$\mathcal{N}(\rho) = \left| \sum_{\lambda_i < 0} \lambda_i \right| = \sum_i \frac{|\lambda_i| - \lambda_i}{2}. \quad (1.24)$$

As equações (1.22) e (1.24) mensura o quanto  $\rho^{Ts}$  não é positivo levando em consideração o critério de separabilidade de Peres (PERES, 1996).

Outro quantificador de emaranhamento para sistemas de dois qubits é a concorrência  $\mathcal{C}$  dada por (WOOTTERS, 1998; WOOTTERS, 2001)

$$\mathcal{C}(\rho) = \sqrt{2(1 - \text{Tr}(\rho_S^2))}. \quad (1.25)$$

Também podemos definir a concorrência  $\mathcal{C}$  em termos dos autovalores da matriz  $R$

$$\mathcal{C}(\rho) = \max(0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4), \quad (1.26)$$

sendo  $\lambda_i$  os autovalores, em ordem decrescente, da matriz hermitiana  $R = \sqrt{\sqrt{\rho} \tilde{\rho} \sqrt{\rho}}$ , com

$$\tilde{\rho} = (\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho^* (\sigma_y \otimes \sigma_y), \quad (1.27)$$

e  $\sigma_y$  sendo a matriz de Pauli  $y$  dada por

$$\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}. \quad (1.28)$$

Tanto a negatividade como a concorrência serão métodos utilizados no decorrer deste trabalho para quantificar o emaranhamento do sistema que será estudado.

## 1.5 O Qubit

Nos computadores convencionais são utilizados bits para processar e armazenar informações. O bit (*binary digit*) é a menor unidade de informação utilizada por computadores e possui um valor binário, no caso do *hardware* pulsos elétricos que representam ligado ou desligado irão representar no *software* os valores 0 ou 1, respectivamente. Por outro lado, a menor unidade de informação na quântica é chamada de qubit (*quantum bit*) que é representado por um sistema de dois níveis, porém, diferente dos bits clássicos que só podem assumir valores 0 ou 1, os qubits podem assumir valores 0, 1 e um estado de superposição entre 0 e 1.

Podemos escrever um qubit puro mais geral e normalizado em um espaço de Hilbert bidimensional na forma

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad (1.29)$$

sendo  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ , e  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  a base computacional dada por

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \text{ e } |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (1.30)$$

Se for realizada uma medição na base  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ , então teremos uma probabilidade  $|\alpha|^2$  de obter  $|0\rangle$  e probabilidade  $|\beta|^2$  de obter  $|1\rangle$ . De acordo com o quinto postulado, o ato de medir o qubit perturba o estado, logo não é possível determinar  $\alpha$  e  $\beta$  em uma única medida. Essa propriedade se difere dos bits clássicos, onde podemos medir sem perturbação, ou seja, se após medir um bit ele resultar em 1, então é possível afirmar com 100% de certeza que antes da medida o bit era 1.

Os coeficientes  $\alpha$  e  $\beta$  da Eq. (1.29) são, no caso mais geral, números complexos, logo podemos reescrever a equação na forma

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\alpha|e^{ia}|0\rangle + |\beta|e^{ib}|1\rangle \\ &= e^{ia}(|\alpha||0\rangle + |\beta|e^{i(b-a)}|1\rangle). \end{aligned} \quad (1.31)$$

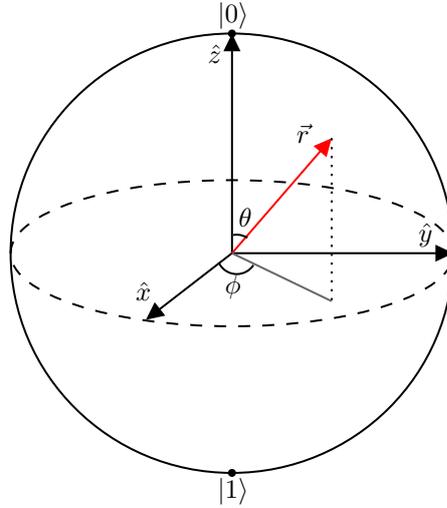
Chamamos  $e^{ia}$  de fase global e  $e^{i(b-a)}$  de fase relativa, sendo que, diferente da fase relativa, a fase global não tem relevância física. Então podemos desprezar o termo que representa a fase global na Eq. (1.31), além disso podemos definir que  $b - a = \phi$ , onde  $\phi$  é um número real, dessa forma reescrevemos a equação da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\alpha||0\rangle + |\beta|e^{i\phi}|1\rangle \\ &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\phi}\text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle, \end{aligned} \quad (1.32)$$

onde, na última linha, consideramos  $|\alpha| = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)$  e  $|\beta| = \text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right)$  que foi extraída da relação  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \text{sen}^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$ .

Na Eq. (1.29) precisávamos de dois números complexos para representar um qubit, porém com as considerações feitas até a Eq. (1.32) podemos descrever um qubit por dois números reais, onde  $0 \leq \theta \leq \pi$  e  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ , e podemos associar esses valores com um vetor  $\vec{r} = (x, y, z) = (\text{sen}(\theta)\cos(\phi), \text{sen}(\theta)\text{sen}(\phi), \cos(\theta))$ , onde o vetor  $\vec{r}$  localiza o estado na esfera de Bloch. Dessa forma é possível representar um qubit de forma geométrica utilizando a esfera de Bloch (Fig.(2)), sendo que qubits puros possuem raio 1, e por conta disso estão localizados na superfície da esfera, e qubits mistos possuem raio  $0 \leq r < 1$ .

Figura 2: Esfera de Bloch



Representação de um qubit puro na esfera de Bloch. O vetor  $\vec{r}$  é localizado na esfera a partir dos parâmetros  $\theta$  e  $\phi$ , permitindo varrer toda a superfície da esfera. Para um qubit misto o vetor que localiza o estado possui módulo menor que um, ou seja, está localizado dentro da esfera, sendo que, quanto mais próximo do centro da esfera, maior o grau de mistura. **Fonte:** Autoria própria

Podemos representar o operador densidade em termos do vetor  $\vec{r}$ . Para isso, vamos escrever o operador densidade para o estado da Eq. (1.32)

$$\begin{aligned} \rho &= |\psi\rangle\langle\psi| \\ &= \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle\langle 0| + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle\langle 1| + \\ &\quad + e^{-i\phi} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle\langle 1| + e^{i\phi} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle\langle 0|, \end{aligned} \quad (1.33)$$

ou na forma matricial

$$\begin{aligned} \rho &= \begin{bmatrix} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) & e^{i\phi} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ e^{i\phi} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{1+\cos(\theta)}{2} & \frac{e^{-i\phi} \sin(\theta)}{2} \\ \frac{e^{i\phi} \sin(\theta)}{2} & \frac{1-\cos(\theta)}{2} \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \left( \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \sin(\theta) \cos(\phi) \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + \sin(\theta) \sin(\phi) \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} + \cos(\theta) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \right) \\ &= \frac{1}{2} (\mathbb{I} + \sin(\theta) \cos(\phi) \sigma_x + \sin(\theta) \sin(\phi) \sigma_y + \cos(\theta) \sigma_z), \end{aligned} \quad (1.34)$$

sendo  $\sigma_i$ , com  $i = x, y, z$ , as matrizes de Pauli. Percebemos que a Eq. (1.34) pode ser expressa na forma de um produto interno entre o vetor  $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  com o vetor  $\vec{r}$ , também conhecido como vetor de Bloch. Dessa forma, temos a representação geométrica da matriz densidade de um qubit puro dada por

$$\rho = \frac{\mathbb{I} + \vec{r} \cdot \vec{\sigma}}{2}. \quad (1.35)$$

Para um estado misto, podemos representar como uma soma com pesos probabilísticos de elementos como o da Eq. (1.35), da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_i p_i \left( \frac{\mathbb{I} + \vec{r}_i \cdot \vec{\sigma}}{2} \right) \\ &= \frac{\sum_i p_i \mathbb{I} + \sum_i p_i \vec{r}_i \cdot \vec{\sigma}}{2} \\ &= \frac{\mathbb{I} + \vec{S} \cdot \vec{\sigma}}{2}, \end{aligned} \quad (1.36)$$

sendo  $\vec{S} = \sum_i p_i \vec{r}_i$ , onde é  $|\vec{S}| \leq 1$ . Porém a igualdade só é válida para um qubit puro.

## 1.6 Operações quânticas

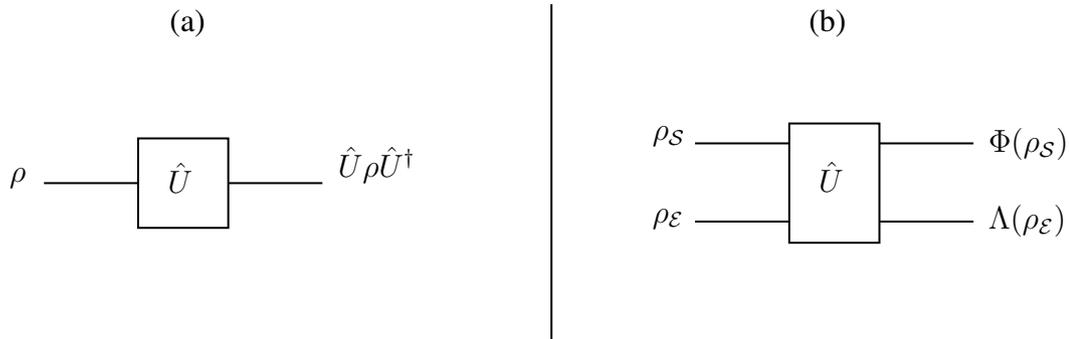
Operações quânticas são formulações matemáticas que descrevem a dinâmica de sistemas quânticos que são submetidos a algum processo físico. Nesta descrição, o estado inicial  $\rho$  do sistema é transformado de acordo com um mapa denotado por  $\Phi(\rho)$ , tal que (NIELSEN; CHUANG, 2002)

$$\Phi(\rho) = \rho', \quad (1.37)$$

onde o mapa  $\Phi$  é a operação quântica e  $\rho'$  é o estado após a aplicação do mapa. Um exemplo de operação quântica é a transformação unitária  $\Phi(\rho) = \hat{U} \rho \hat{U}^\dagger$ , que é equivalente a Eq. (1.7) para o formalismo de operador densidade.

A dinâmica de um sistema fechado é dada por uma evolução unitária, como já dito anteriormente. Comumente, imaginamos a transformação unitária como uma caixa, na qual o estado quântico inicial entra pela esquerda, e pela direita sai o estado após a evolução, como na Fig. 3 (a). Para a dinâmica de sistemas abertos consideramos o sistema de interesse e o ambiente, que juntos formam um sistema fechado, como ilustrado na Fig. 3 (b). Neste caso, temos o estado de interesse  $\rho_S$  e o ambiente  $\rho_E$ , inicialmente separados. O estado  $\rho_S$  é enviado para a caixa que está acoplada com o ambiente  $\rho_E$ .

Figura 3: Representação de um sistema quântico aberto e fechado



Sistema quântico fechado (a) e aberto (b). O sistema quântico aberto consiste em duas partes, o sistema principal e o ambiente. **Fonte:** Nielsen e Chuang (2002), com adaptações.

Ao final da transformação, se estivermos interessados no comportamento do sistema, devemos considerar o estado total e tomar o traço parcial sobre os estados do ambiente para obtermos o estado reduzido do sistema. Então, temos  $\Phi(\rho_S)$  e  $\Lambda(\rho_E)$  dados por

$$\Phi(\rho_S) = \text{Tr}_E \left( \hat{U}(\rho_S \otimes \rho_E) \hat{U}^\dagger \right), \quad (1.38)$$

$$\Lambda(\rho_E) = \text{Tr}_S \left( \hat{U}(\rho_S \otimes \rho_E) \hat{U}^\dagger \right). \quad (1.39)$$

No caso em que  $\hat{U}$  atua exclusivamente no sistema, ou seja,  $\hat{U} = \hat{U}_S \otimes \mathbb{I}_E$ , então da Eq. (1.38), obtemos

$$\begin{aligned} \Phi(\rho_S) &= \text{Tr}_E \left( \hat{U}(\rho_S \otimes \rho_E) \hat{U}^\dagger \right) \\ &= \text{Tr}_E \left( (\hat{U}_S \otimes \mathbb{I}_E)(\rho_S \otimes \rho_E)(\hat{U}_S \otimes \mathbb{I}_E)^\dagger \right) \\ &= \text{Tr}_E \left( (\hat{U}_S \rho_S \hat{U}_S^\dagger) \otimes \rho_E \right) \\ &= (\hat{U}_S \rho_S \hat{U}_S^\dagger) \text{Tr}_E(\rho_E) \\ &= \hat{U}_S \rho_S \hat{U}_S^\dagger, \end{aligned} \quad (1.40)$$

que é o resultado esperado, pois quando o operador evolução  $\hat{U}$  afeta somente o sistema e não o ambiente, a evolução final do sistema é unitária e independente do ambiente.

### 1.6.1 Operadores de Kraus

A primeira proposta das operações quânticas foi feita por Kurt Kraus em 1983 (KRAUS, 1983), como parte dos estudos sobre a mecânica quântica da medição. Os operadores de Kraus permitem descrever a evolução de um sistema quântico submetido a uma transformação, representando a relação entre o estado inicial e o estado final através de um conjunto de operadores, e são uma forma mais elegante de se representar as operações quânticas como a Eq. (1.38) apenas no espaço de Hilbert do sistema principal.

Através de uma simples análise, podemos obter os operadores de Kraus. Assumindo uma

base  $|e_k\rangle$  no espaço do ambiente e tomando  $\rho_{\mathcal{E}} = |e_0\rangle\langle e_0|$  como o estado inicial do ambiente, podemos reescrever a Eq. (1.38) como

$$\begin{aligned}\Phi(\rho_S) &= \sum_k \langle e_k | \hat{U} (\rho_S \otimes |e_0\rangle\langle e_0|) \hat{U}^\dagger | e_k \rangle \\ &= \sum_k \hat{E}_k \rho_S \hat{E}_k^\dagger,\end{aligned}\tag{1.41}$$

onde  $\hat{E}_k = \langle e_k | \hat{U} | e_0 \rangle$  é chamado operador de Kraus, que é representado no espaço do sistema.

A relação de completeza é cumprida pelos operadores de Kraus, que decorre da exigência de que o traço de  $\Phi(\rho_S)$  seja unitário.

$$\begin{aligned}1 &= \text{Tr}(\Phi(\rho_S)) \\ &= \text{Tr} \left( \sum_k \hat{E}_k \rho_S \hat{E}_k^\dagger \right) \\ &= \text{Tr} \left( \sum_k \hat{E}_k^\dagger \hat{E}_k \rho_S \right),\end{aligned}\tag{1.42}$$

sendo que na última igualdade utilizamos a propriedade de que o traço é invariante diante de permutações cíclicas. Com isso concluímos que

$$\sum_k \hat{E}_k^\dagger \hat{E}_k = \mathbb{I}.\tag{1.43}$$

A Eq. (1.43) só é satisfeita por operações quânticas que preservam o traço. Para operações que não preservam o traço, temos

$$\sum_k \hat{E}_k^\dagger \hat{E}_k \leq \mathbb{I}.\tag{1.44}$$

Essa desigualdade é satisfeita geralmente por operações que envolvem a mediação, onde a preservação do traço não é garantida, pois a medição geralmente altera o estado do sistema.

Para o caso em que o ambiente não se inicia em um estado puro, mas sim num estado misto dado por  $\rho_{\mathcal{E}} = \sum_j p_j |e_j\rangle\langle e_j|$ , temos

$$\begin{aligned}\Phi(\rho_S) &= \sum_k \langle e_k | \hat{U} \left( \rho_S \otimes \sum_j p_j |e_j\rangle\langle e_j| \right) \hat{U}^\dagger | e_k \rangle \\ &= \sum_j \sum_k \sqrt{p_j} \langle e_k | \hat{U} | e_j \rangle \rho_S \sqrt{p_j} \langle e_j | \hat{U}^\dagger | e_k \rangle \\ &= \sum_j \sum_k \hat{E}_{jk} \rho_S \hat{E}_{jk}^\dagger,\end{aligned}\tag{1.45}$$

onde  $\hat{E}_{jk} = \sqrt{p_j} \langle e_k | \hat{U} | e_j \rangle$ .

Essa equação é uma generalização da Eq. (1.41), que proporciona uma maneira explícita de calcular os operadores de Kraus desde que o estado inicial de  $\rho_{\mathcal{E}}$  e a dinâmica entre o sistema e

o ambiente sejam conhecidos (NIELSEN; CHUANG, 2002).

### 1.6.2 Canais bit flip, phase flip e bit-phase flip

Os canais *bit flip* (ou bit-flip channels) são modelos matemáticos utilizados para descrever processos de decoerência em sistemas quânticos. Eles modelam erros de bit-flip, ou seja, erros que ocorrem quando um qubit é invertido (de 0 para 1 ou de 1 para 0). Esses erros podem ocorrer devido a interações quânticas com o ambiente ou devido a imperfeições no processo de medição.

Os canais bit flip são descritos pelos operadores de Kraus, que descrevem a evolução do estado quântico do sistema. Há dois operadores, um que preserva o estado original e o outro que inverte o qubit (NIELSEN; CHUANG, 2002). Definindo o operador densidade do ambiente como  $\rho_{\mathcal{E}} = p|e_0\rangle\langle e_0| + (1-p)|e_1\rangle\langle e_1|$ , a dinâmica gerada pelo canal bit flip pode ser representado pelo diagrama abaixo e, a partir dele, construir o operador evolução temporal  $\hat{U}$ :

$$|0, e_0\rangle \longrightarrow |0, e_0\rangle,$$

$$|1, e_0\rangle \longrightarrow |1, e_0\rangle,$$

$$|0, e_1\rangle \longrightarrow |1, e_1\rangle,$$

$$|1, e_1\rangle \longrightarrow |0, e_1\rangle,$$

$$\begin{aligned} \implies \hat{U} &= |0, e_0\rangle\langle 0, e_0| + |1, e_0\rangle\langle 1, e_0| + |1, e_1\rangle\langle 0, e_1| + |0, e_1\rangle\langle 1, e_1| \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (1.46)$$

Conhecendo o operador densidade do ambiente e a matriz evolução temporal, encontramos os operadores de Kraus, como sendo

$$\hat{E}_{00} = \sqrt{p}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) = \sqrt{p}\mathbb{I} = \sqrt{p} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (1.47)$$

$$\hat{E}_{11} = \sqrt{1-p}(|1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1|) = \sqrt{1-p}X = \sqrt{1-p} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (1.48)$$

onde  $X$  é uma matriz de Pauli.

A partir desse ponto, podemos calcular o mapa do sistema para um qubit puro geral dado pela Eq. (1.35), com a ajuda da Eq. (1.45). Supondo que  $\rho_S = (\mathbb{I} + \vec{r} \cdot \vec{\sigma})/2$ , podemos escrever  $\rho_S$  na forma matricial

$$\rho_S = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + r_z & r_x - ir_y \\ r_x + ir_y & 1 - r_z \end{bmatrix}, \quad (1.49)$$

onde  $r_x$ ,  $r_y$  e  $r_z$  são as componentes do vetor de Bloch  $\vec{r}$ . Dessa forma, o mapa  $\Phi(\rho_S)$  será

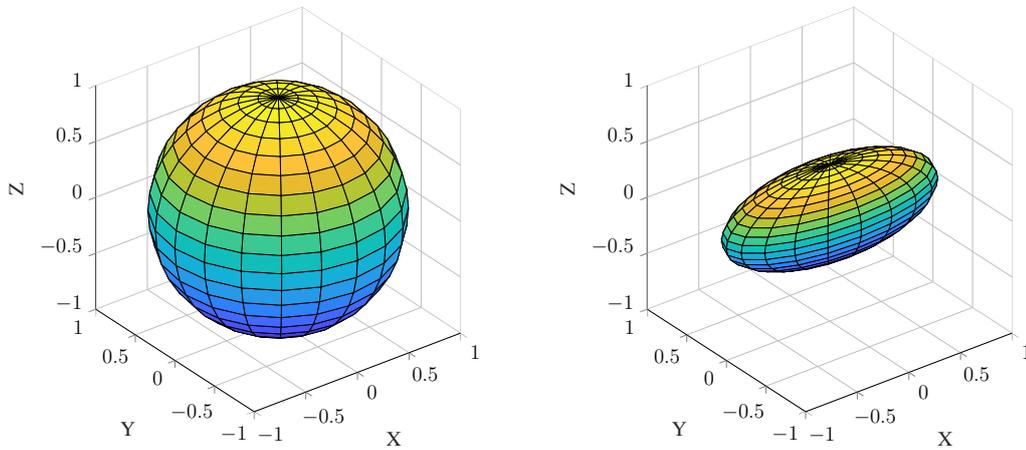
$$\begin{aligned} \Phi(\rho_S) &= \sum_j \sum_k \hat{E}_{jk} \rho_S \hat{E}_{jk}^\dagger \\ &= \hat{E}_{00} \rho_S \hat{E}_{00}^\dagger + \hat{E}_{11} \rho_S \hat{E}_{11}^\dagger \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 - r_z(1 - 2p) & r_x + ir_y(1 - 2p) \\ r_x - ir_y(1 - 2p) & 1 + r_z(1 - 2p) \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (1.50)$$

Ao comparar a Eq. (1.50) com a Eq. (1.49), notamos que as componentes do vetor de Bloch foram modificadas da seguinte maneira

$$\begin{aligned} r_x &\longrightarrow r_x, \\ r_y &\longrightarrow -r_y(1 - 2p), \\ r_z &\longrightarrow -r_z(1 - 2p). \end{aligned}$$

O efeito geométrico que o canal bit flip causa na esfera de Bloch é ilustrado na Fig. (4)

Figura 4: Representação geométrica do efeito do canal bit flip



A ação do canal bit flip na esfera de Bloch é ilustrada quando  $p = 0,3$ . A esfera à esquerda representa todos os estados puros possíveis, enquanto a esfera distorcida à direita representa os estados após passarem pelo canal. É possível notar que os estados no eixo  $x$  permanecem inalterados, enquanto o plano  $y - z$  é contraído de forma uniforme por um fator de  $1 - 2p$ . **Fonte:** Autoria própria

A representação gráfica da esfera de Bloch mostrada na Fig. (4) ilustra como o canal de bit flip não pode aumentar a norma do vetor de Bloch. Isso permite concluir que  $\text{Tr}(\rho^2)$  só pode diminuir quando o canal bit flip é aplicado.

De forma semelhante, temos o canal *phase flip*. Este canal modela erros de phase flip, ou seja, erros que ocorrem quando a fase de um qubit é invertida (por exemplo, de  $|1\rangle$  para  $-|1\rangle$ ).

A dinâmica e o operador evolução temporal são dados por

$$\begin{aligned}
|0, e_0\rangle &\longrightarrow |0, e_0\rangle, \\
|1, e_0\rangle &\longrightarrow |1, e_0\rangle, \\
|0, e_1\rangle &\longrightarrow |0, e_1\rangle, \\
|1, e_1\rangle &\longrightarrow -|1, e_1\rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\implies \hat{U} &= |0, e_0\rangle\langle 0, e_0| + |1, e_0\rangle\langle 1, e_0| + |0, e_1\rangle\langle 0, e_1| - |1, e_1\rangle\langle 1, e_1| \\
&= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},
\end{aligned} \tag{1.51}$$

que possui os operadores de Kraus

$$\hat{E}_{00} = \sqrt{p}\mathbb{I} = \sqrt{p} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \tag{1.52}$$

$$\hat{E}_{11} = \sqrt{1-p}Z = \sqrt{1-p} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \tag{1.53}$$

sendo  $Z$  uma matriz de Pauli. O mapa  $\Phi(\rho_S)$ , para um qubit puro geral, fica

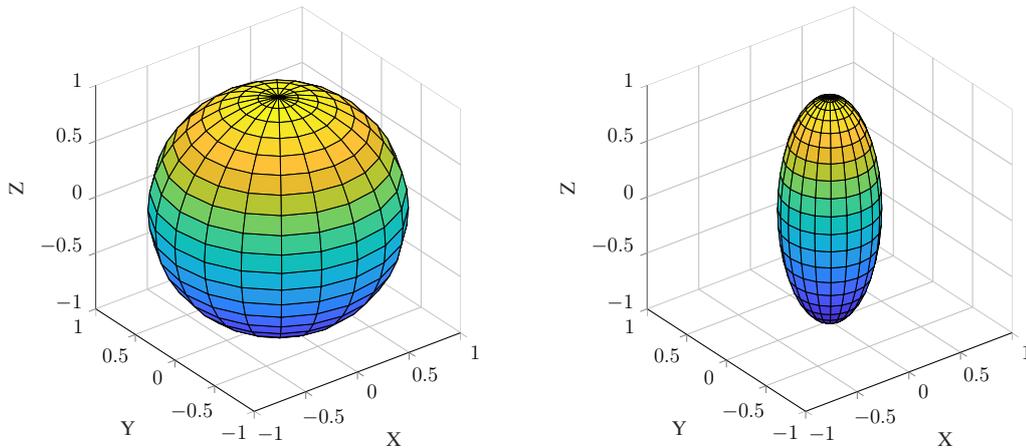
$$\begin{aligned}
\Phi(\rho_S) &= \sum_j \sum_k \hat{E}_{jk} \rho_S \hat{E}_{jk}^\dagger \\
&= \hat{E}_{00} \rho_S \hat{E}_{00}^\dagger + \hat{E}_{11} \rho_S \hat{E}_{11}^\dagger \\
&= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + r_z & -r_x(1-2p) + ir_y(1-2p) \\ -r_x(1-2p) - ir_y(1-2p) & 1 - r_z \end{bmatrix},
\end{aligned} \tag{1.54}$$

ou seja,

$$\begin{aligned}
r_x &\longrightarrow -r_x(1-2p), \\
r_y &\longrightarrow -r_y(1-2p), \\
r_z &\longrightarrow r_z.
\end{aligned}$$

O efeito do canal de inversão de fase é ilustrado na Fig. (5).

Figura 5: Representação geométrica do efeito do canal phase flip



A esfera de Bloch afetada pelo canal phase flip com  $p = 0,3$ , onde os estados no eixo  $z$  são preservados enquanto o plano  $x - y$  é uniformemente contraído por um fator de  $1 - 2p$ . **Fonte:** Autoria própria

O canal *bit-phase flip* (ou bit-phase flip channel) é um modelo matemático que descreve erros que ocorrem quando um qubit é invertido (de 0 para 1 ou de 1 para 0) e também sofre uma inversão de fase, ou seja, é equivalente a aplicar simultaneamente os canais bit flip e phase flip. Os operadores de Kraus para esse canal são dados por

$$\hat{E}_{00} = \sqrt{p}\mathbb{I} = \sqrt{p} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (1.55)$$

$$\hat{E}_{11} = \sqrt{1-p}Y = \sqrt{1-p} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad (1.56)$$

onde  $Y$  é uma matriz de Pauli e pode ser reescrita como  $Y = iXZ$ . O canal altera as componentes do vetor de Bloch  $\vec{r}$  da seguinte maneira

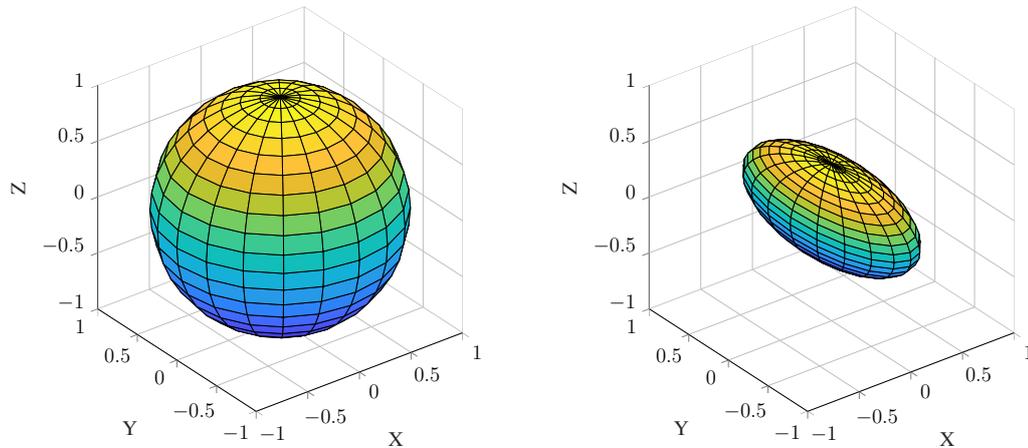
$$r_x \longrightarrow -r_x(1 - 2p),$$

$$r_y \longrightarrow r_y,$$

$$r_z \longrightarrow -r_z(1 - 2p).$$

A ação do canal na esfera de Bloch está ilustrada na Fig. (6)

Figura 6: Representação geométrica do efeito do canal bit-phase flip



A esfera de Bloch afetada pelo canal bit-phase flip com  $p = 0,3$ , onde os estados no eixo  $y$  são preservados enquanto os estados do plano  $x - z$  são uniformemente contraídos por um fator de  $1 - 2p$ .

**Fonte:** Autoria própria

Esse canal é menos comum que o canal bit flip, mas é um modelo que pode ser utilizado para descrever a dinâmica de sistemas quânticos que sofrem erros de bit-phase flip.

### 1.6.3 Canal de despolarização

O canal de despolarização é um modelo matemático que também descreve erros causados pela interação de um sistema quântico com o ambiente. Uma característica distinta desse canal é sua capacidade de transformar estados puros em estados mistos (NIELSEN; CHUANG, 2002), que pode ser observada pela contração da esfera de Bloch, como será discutido posteriormente.

Suponha que um qubit, representado pelo estado  $\rho_S$ , esteja interagindo com o ambiente  $\rho_E$ , e devido a essa interação, o qubit pode sofrer erros com uma probabilidade  $p$ . Existem três tipos de erros possíveis: bit flip, phase flip e bit-phase flip, todos com a mesma probabilidade  $p/3$ . O estado inicial do ambiente é dado por

$$\rho_E = \left(1 - \frac{3p}{4}\right) |e_0\rangle\langle e_0| + \frac{p}{4}(|e_1\rangle\langle e_1| + |e_2\rangle\langle e_2| + |e_3\rangle\langle e_3|), \quad (1.57)$$

sendo que o estado  $|e_0\rangle$  está associado à preservação do qubit,  $|e_1\rangle$  com o erro de bit flip,  $|e_2\rangle$  com o erro de inversão de fase e  $|e_3\rangle$  com o erro de bit-phase flip. A dinâmica da interação é representada no diagrama abaixo

$$\begin{aligned}
|0, e_0\rangle &\longrightarrow |0, e_0\rangle, \\
|1, e_0\rangle &\longrightarrow |1, e_0\rangle, \\
|0, e_1\rangle &\longrightarrow |1, e_1\rangle, \\
|1, e_1\rangle &\longrightarrow |0, e_1\rangle, \\
|0, e_2\rangle &\longrightarrow |0, e_2\rangle, \\
|1, e_2\rangle &\longrightarrow -|1, e_2\rangle, \\
|0, e_3\rangle &\longrightarrow i|1, e_3\rangle, \\
|1, e_3\rangle &\longrightarrow -i|0, e_3\rangle.
\end{aligned}$$

Sendo o operador  $\hat{U}$

$$\hat{U} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (1.58)$$

Neste caso, temos quatro operadores de Kraus, que são dados por:

$$\hat{E}_{00} = \sqrt{\left(1 - \frac{3p}{4}\right)} \mathbb{I} = \sqrt{\left(1 - \frac{3p}{4}\right)} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \hat{E}_{11} = \frac{\sqrt{p}}{2} X = \frac{\sqrt{p}}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (1.60)$$

$$\hat{E}_{22} = \frac{\sqrt{p}}{2} Z = \frac{\sqrt{p}}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (1.61) \quad \hat{E}_{33} = \frac{\sqrt{p}}{2} Y = \frac{\sqrt{p}}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}. \quad (1.62)$$

Com isso, podemos calcular o mapa do sistema

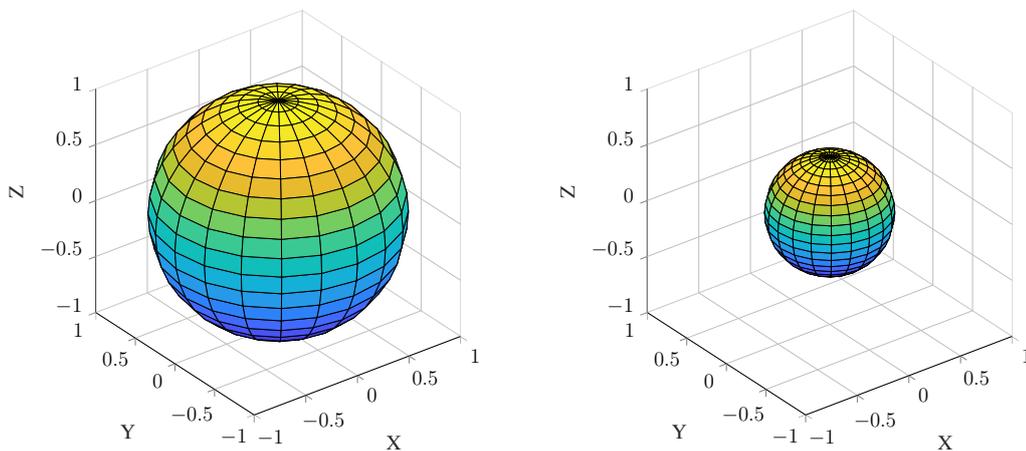
$$\begin{aligned}
\Phi(\rho_S) &= \sum_j \sum_k \hat{E}_{jk} \rho_S \hat{E}_{jk}^\dagger \\
&= \hat{E}_{00} \rho_S \hat{E}_{00}^\dagger + \hat{E}_{11} \rho_S \hat{E}_{11}^\dagger + \hat{E}_{22} \rho_S \hat{E}_{22}^\dagger + \hat{E}_{33} \rho_S \hat{E}_{33}^\dagger \\
&= \left(1 - \frac{3p}{4}\right) \rho_S + \frac{p}{4} (X \rho_S X + Y \rho_S Y + Z \rho_S Z) \\
&= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + r_z(1-p) & r_x(1-p) - ir_y(1-p) \\ r_x(1-p) + ir_y(1-p) & 1 - r_z(1-p) \end{bmatrix} \\
&= \frac{p\mathbb{I}}{2} + (1-p)\rho_S,
\end{aligned} \tag{1.63}$$

onde, ao compararmos com a equação (1.49), observamos que as componentes do vetor de Bloch sofreram a seguinte transformação

$$\begin{aligned}
r_x &\longrightarrow r_x(1-p), \\
r_y &\longrightarrow r_y(1-p), \\
r_z &\longrightarrow r_z(1-p).
\end{aligned}$$

Notamos que, de acordo com as componentes do Vetor de Bloch e pela Eq. (1.63), à medida que  $p \rightarrow 1$ , o estado se torna cada vez mais misto, conforme pode ser observado na figura abaixo.

Figura 7: Representação geométrica do efeito do canal de despolarização



Efeito do canal de despolarização na esfera de Bloch, com  $p = 0,6$ . Podemos observar uma contração uniforme, e à medida que a probabilidade de erro  $p$  aumenta, a esfera de Bloch é contraída cada vez mais até que, no limite  $p = 1$ , o estado se torne completamente misto. **Fonte:** Autoria própria

### 1.6.4 Canal de amortecimento de amplitude

O canal de amortecimento de amplitude (ou *amplitude damping channel*) descreve erros que ocorrem em sistemas quânticos devido à perda de excitação (ou amplitude) de um qubit, devido à interação com o ambiente. Isso é semelhante ao decaimento ou amortecimento do

estado quântico. É importante notar que essa dinâmica leva a um estado estacionário e é frequentemente usada para modelar a interação entre um qubit e um ambiente térmico.

Para uma melhor compreensão, vamos considerar um átomo com dois níveis de energia em um ambiente, inicialmente no estado de vácuo, ou seja,  $|e_0\rangle$ . A dinâmica do sistema será dada da seguinte forma: se o átomo iniciar no estado excitado  $|1\rangle$ , então haverá uma probabilidade  $p$  de ele retornar ao estado fundamental  $|0\rangle$  e emitir um fóton para o ambiente, que passará do estado  $|e_0\rangle$  para o estado  $|e_1\rangle$ , e uma probabilidade  $1-p$  de nada acontecer. Caso o átomo inicie no estado fundamental  $|0\rangle$ , então não haverá dinâmica, dada a condição inicial do ambiente no estado de vácuo. O diagrama abaixo representa a dinâmica:

$$\begin{aligned} |0, e_0\rangle &\longrightarrow |0, e_0\rangle, \\ |1, e_0\rangle &\longrightarrow \sqrt{1-p}|1, e_0\rangle + \sqrt{p}|0, e_1\rangle. \end{aligned}$$

Conhecendo a dinâmica, podemos construir a matriz unitária

$$\begin{aligned} \hat{U} &= |0, e_0\rangle\langle 0, e_0| + \sqrt{1-p}|1, e_0\rangle\langle 1, e_0| + \sqrt{p}|0, e_1\rangle\langle 1, e_0| \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{p} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{1-p} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (1.64)$$

e a partir de  $\hat{U}$  encontrar os operadores de Kraus, dados por

$$\hat{E}_{00} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p} \end{bmatrix}, \quad (1.65)$$

$$\hat{E}_{01} = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{p} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (1.66)$$

Com isso obtemos o mapa do sistema

$$\begin{aligned} \Phi(\rho_S) &= \sum_j \sum_k \hat{E}_{jk} \rho_S \hat{E}_{jk}^\dagger \\ &= \hat{E}_{00} \rho_S \hat{E}_{00}^\dagger + \hat{E}_{11} \rho_S \hat{E}_{11}^\dagger \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + [r_z(1-p) + p] & r_x \sqrt{1-p} - ir_y \sqrt{1-p} \\ r_x \sqrt{1-p} + ir_y \sqrt{1-p} & 1 - [r_z(1-p) + p] \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (1.67)$$

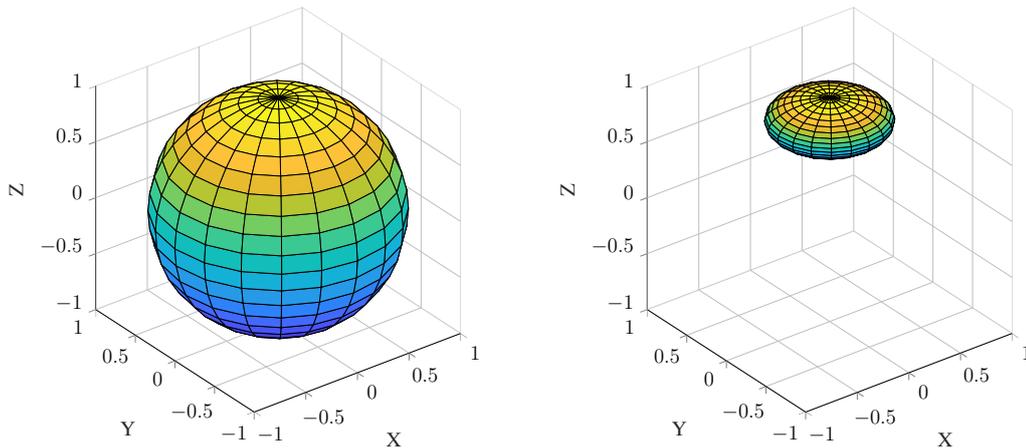
onde podemos observar que o vetor de Bloch mudou da seguinte forma

$$\begin{aligned} r_x &\longrightarrow r_x \sqrt{1-p}, \\ r_y &\longrightarrow r_y \sqrt{1-p}, \\ r_z &\longrightarrow r_z(1-p) + p. \end{aligned} \quad (1.68)$$

Assim, a esfera de Bloch é deformada em um elipsoide, cujos eixos estão alinhados ao

longo dos eixos  $x$ ,  $y$  e  $z$ , e cujo centro é  $(0, 0, p)$ . É evidente pela Eq. (1.68) que o parâmetro  $p$  representa a probabilidade de o estado  $|1\rangle$  decair para o estado  $|0\rangle$  (BENENTI; CASATI; STRINI, 2007), como podemos observar na figura abaixo.

Figura 8: Representação geométrica do efeito do canal de amortecimento de amplitude



A contração da esfera de Bloch devido ao canal de amortecimento de amplitude, com probabilidade de  $p = 0,8$ , mostra como toda a esfera é direcionada para o estado  $|0\rangle$ . **Fonte:** Autoria própria

## 1.7 Entropia e informação

Esta seção visa explorar meios de quantificar informação para sistemas quânticos. Para tal, será necessária a introdução do conceito de entropia de Shannon como um quantificador de informação. Para iniciar esse assunto, devemos partir da quantificação da informação clássica, através da entropia de Shannon. Após isso, utilizando propriedades do operador densidade, podemos generalizar a entropia de Shannon para sistemas quânticos, que recebe o nome de entropia de von Neumann (PETZ, 2007).

### 1.7.1 Entropia de Shannon

A entropia de Shannon é uma grandeza que mede a quantidade de informação ou a imprevisibilidade de um sistema. Ela foi proposta pelo matemático e engenheiro Claude Shannon em 1948 (SHANNON, 1948), como parte de sua teoria da informação, que visava analisar e otimizar a transmissão de informações em sistemas de comunicação. Shannon utilizou a lei dos grandes números e afirmou que, uma mensagem composta de  $N$  letras, onde  $N$  é um número muito grande, pode ser entendida como sendo formada por  $Np_1$  de 1's e  $Np_0$  de 0's (PLENIO; VITELLI, 2001), onde  $p_0$  e  $p_1$  são as probabilidades de obtermos 0 e 1, respectivamente.

Podemos exemplificar com um problema mais simples, onde  $N = 8$ , e as probabilidades  $p_1$  e  $p_0$  são  $\frac{1}{8}$  e  $\frac{7}{8}$ , respectivamente. Nesta situação, qual é o número de mensagens típicas que é

possível obter? A resposta está em quantas maneiras os  $Np_1$  1's podem ser arranjados em uma sequência de  $N$  letras, ou seja

$$\binom{N}{Np_1} = \frac{N!}{(Np_1)!(Np_0)!}, \quad (1.69)$$

que no exemplo será 8, todos com a mesma probabilidade de ocorrer. Podemos rotular cada uma das mensagens utilizando números binários. Como temos 8 possibilidades, utilizaremos os números de 0 a 7 em binário para rotular, onde precisaremos de 3 bits, dessa forma pode se diferenciar cada mensagem de forma inequívoca. Para um caso geral, podemos encontrar a quantidade de bits necessária para rotular a mensagem tomando o logaritmo na base 2 da Eq. (1.69), ou seja,

$$I = \log \frac{N!}{(Np_1)!(Np_0)!}, \quad (1.70)$$

utilizando a formula de Stirling, onde  $\log N! \simeq N \log N - N$  para  $N \rightarrow \infty$ , temos

$$I = -N (p_1 \log p_1 + p_0 \log p_0). \quad (1.71)$$

Podemos generalizar a Eq. (1.71) para um alfabeto de  $x$  letras, com probabilidades  $p_x$ . Nesse caso, a quantidade média de informação transmitida em bits por símbolo em uma mensagem composta por um grande número  $N$  de letras é dada pela entropia de Shannon:

$$\frac{I}{N} = H(p_1, p_2, \dots, p_x) = - \sum_x p_x \log(p_x). \quad (1.72)$$

Também podemos abordar a entropia de Shannon através do conceito de surpresa. A entropia de Shannon é derivada da ideia de que quanto mais incerto é o resultado de uma medição ou a ocorrência de um evento, mais informação é gerada. Considere que o alfabeto é formado apenas por dois caracteres, 1 e 0, que ocorrem com probabilidades  $p_1 = 0,1$  e  $p_0 = 0,9$ , respectivamente. Suponha que Bob está enviando uma mensagem muito longa para Alice, qual é a média de informação transmitida por caractere? Se não levar em conta as probabilidades associadas a cada caractere, podemos ingenuamente dizer que a informação transmitida por caractere é de 1 bit. Porém, podemos associar a quantidade de informação presente na mensagem à surpresa. Nesse caso, ao se deparar com um caractere da mensagem, Alice pode adivinhar o caractere em 90% das vezes se assumir que o caractere sempre será 0. No entanto, se os caracteres 0 e 1 tiverem a mesma probabilidade, então ela acertará apenas 50% das vezes. Portanto, a surpresa de Alice será maior no segundo caso, pois o resultado é mais imprevisível. Podemos quantificar a surpresa de Alice, definida pela letra  $x$ , que ocorre com uma probabilidade  $p_x$ , como (PLENIO; VITELLI, 2001)

$$x = \log \frac{1}{p_x}, \quad (1.73)$$

ou seja, a surpresa é usada para avaliar o nível de incerteza ou imprevisibilidade de um sistema

ou evento, medindo a quantidade de informação gerada por eles.

O uso da função logaritmo é para que a surpresa seja aditiva, então

$$\log\left(\frac{1}{p_x p_y}\right) = \log\frac{1}{p_x} + \log\frac{1}{p_y}. \quad (1.74)$$

A entropia de Shannon é uma medida da média de surpresa de todos os resultados possíveis de uma medição ou evento, usada para avaliar a quantidade de informação presente em um sistema ou mensagem, ou seja

$$H(X) = H(p_1, p_2, \dots, p_x) = -\sum_x p_x \log(p_x). \quad (1.75)$$

Devemos esclarecer alguns pontos da Eq. (1.75), o primeiro é referente a função logarítmica, sendo dado na base 2, já que convencionalmente as entropias são medidas em *bits*. O segundo ponto a ser esclarecido é sobre o caso de  $p_x = 0$ , já que  $\log 0$  é indefinido, por conta disso definimos que  $0 \log 0 \equiv 0$ .

## 1.7.2 Entropia de von Neumann

A teoria quântica é essencialmente probabilística, então é possível trazer conceitos de quantificação de informação clássica para o caso quântico, generalizando a entropia de Shannon. Mas temos que ter em vista que a descrição quântica é realizada em espaços de Hilbert, sendo os observáveis descritos por matrizes. A ideia de von Neumann relaciona a medida de entropia a um operador densidade misto. Operadores puros possuem entropia zero, já que não há ignorância a respeito do estado do sistema.

Como foi dito anteriormente, operadores densidade são hermitianos e positivos, logo seus autovalores são reais e maiores ou igual a zero, além disso, o seu traço é unitário. Com isso podemos considerar o espectro de autovalores da matriz densidade como uma distribuição de probabilidade. Assim, a entropia de von Neumann pode ser dada como a generalização da entropia de Shannon, da seguinte forma:

$$S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log \rho), \quad (1.76)$$

onde o logaritmo é dado na base 2. Se  $\lambda_x$  são os autovalores de  $\rho$ , então podemos reescrever a entropia de von Neumann como

$$S(\rho) = -\sum_x \lambda_x \log \lambda_x, \quad (1.77)$$

e assim como na entropia de Shannon, definimos que  $0 \log 0 \equiv 0$ .

### 1.7.3 Entropia relativa, entropia condicional e informação mútua

A entropia relativa é um quantificador que mede o quão próximo duas distribuições de probabilidade se encontram uma da outra. Considerando duas distribuições de probabilidade,  $p$  e  $q$ , sendo as duas definidas sobre o mesmo espaço de probabilidade  $\Omega$ , de tal forma que  $p = \{p_i\}$  e  $q = \{q_i\}$ , onde  $i \in \Omega$ . Então, definimos a entropia relativa  $H(p_i||q_i)$  referente a essas distribuições de probabilidade, como sendo (NIELSEN; CHUANG, 2002)

$$H(p_i||q_i) = \sum_i p_i \log \frac{p_i}{q_i} = -H(X) - \sum_x p_i \log q_i. \quad (1.78)$$

O teorema abaixo demonstra a não negatividade da Eq. (1.78).

**Teorema 1.** *A entropia relativa é não negativa, ou seja,  $H(p_i||q_i) \geq 0$ , sendo que a igualdade só é válida para o caso onde  $p_i = q_i$  para qualquer  $i$ .*

Podemos demonstrar a validade do teorema 1 utilizando a desigualdade  $\log x \ln(2) = \ln(x) \leq x - 1$ , para qualquer  $x$  positivo, sendo a igualdade válida para  $x = 1$ . Podemos reescrever a desigualdade da forma  $-\log x \geq (1 - x)/\ln(2)$  e então

$$\begin{aligned} H(p_i||q_i) &= - \sum_i p_i \log \frac{q_i}{p_i} \\ &\geq \frac{1}{\ln(2)} \sum_i p_i \left(1 - \frac{q_i}{p_i}\right) \\ &= \frac{1}{\ln(2)} \sum_i (p_i - q_i) \\ &= \frac{1}{\ln(2)} (1 - 1) = 0. \end{aligned} \quad (1.79)$$

Outro quantificador de informação importante é a entropia conjunta. Se  $X$  e  $Y$  forem variáveis aleatórias, então

$$H(X, Y) = - \sum_{x,y} p(x, y) \log p(x, y), \quad (1.80)$$

que fornece o valor da incerteza total entre o par  $(X, Y)$ .

Em algumas situações, podemos nos perguntar quanta informação de  $X$  se relaciona com a informação de  $Y$ . Para responder essa pergunta são necessários dois quantificadores importantes: a entropia condicional e a informação mútua.

A entropia condicional pode ser construída intuitivamente considerando que se conhece  $Y$ . Assim por meio da Eq. (1.75) podemos calcular a quantidade de informação  $H(Y)$  referente ao par  $(X, Y)$ . A incerteza restante sobre o par  $(X, Y)$  está relacionada com a ignorância referente a  $X$ . Com isso, a entropia de  $X$  condicionada ao conhecimento de  $Y$  é definida como

$$H(X|Y) = H(X, Y) - H(Y), \quad (1.81)$$

que nos fornece a ignorância sobre o valor de  $X$ , dado que conhecemos  $Y$ .

A informação mútua mensura a quantidade de informação que  $X$  e  $Y$  tem em comum. Supondo que conhecemos  $X$  e adicionamos parte da informação de  $X$  em  $Y$ , então essa informação será comum entre elas. No entanto, a informação em comum será contabilizada duas vezes, enquanto as informações não comuns serão contadas apenas uma vez. Então, subtraindo a informação conjunta  $H(X, Y)$ , obtemos a informação mútua de  $X$  e  $Y$

$$H(X : Y) = H(X) + H(Y) - H(X, Y). \quad (1.82)$$

Podemos notar que o segundo e o terceiro termo da Eq. (1.82) é  $-H(X|Y)$ , então podemos reescrever a informação mútua como

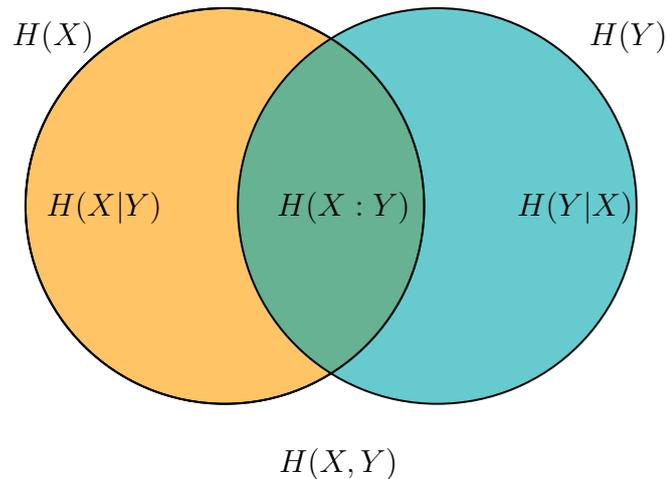
$$H(X : Y) = H(X) - H(X|Y). \quad (1.83)$$

Abaixo listamos algumas propriedades da entropia de Shannon para compreendermos melhor o seu comportamento.

- 1-  $H(X, Y) = H(Y, X), H(X : Y) = H(Y : X)$ .
- 2-  $H(Y|X) \geq 0$ , e  $H(X : Y) \leq H(Y)$ , sendo a igualdade válida se, e somente se,  $Y$  é uma função de  $X$ , ou seja,  $Y = f(X)$ .
- 3-  $H(X) \leq H(X, Y)$ , sendo a igualdade válida apenas se  $Y$  é uma função de  $X$ .
- 4- *subaditividade*:  $H(X, Y) \leq H(X) + H(Y)$ , sendo a igualdade válida se, e somente se,  $X$  e  $Y$  são variáveis aleatórias independentes.
- 5-  $H(Y|X) \leq H(Y)$  e  $H(X : Y) \geq 0$ , sendo a igualdade válida, em cada um dos casos, se  $X$  e  $Y$  são variáveis aleatórias independentes.
- 6- *Subaditividade forte*:  $H(X, Y, Z) + H(Y) \leq H(X, Y) + H(Y, Z)$ , com a igualdade válida se, e somente se,  $Z \rightarrow Y \rightarrow X$  formam uma cadeia de Markov, ou seja, os estados anteriores são irrelevantes para os estados seguintes, desde que conheçamos o estado atual.
- 7- *O condicionamento reduz a entropia*:  $H(X|Y, Z) \leq H(X|Y)$ .

Podemos esquematizar as relações dessas quantidades de entropia com o auxílio de um diagrama de Venn, que ajudam a visualizar melhor.

Figura 9: Diagrama de Venn dos quantificadores de informação



Notamos esquematicamente o funcionamento dos quantificadores, sendo o círculo laranja a entropia de  $X$ , em azul a entropia de  $Y$ . No centro, onde existem informações em comum entre  $X$  e  $Y$ , temos a informação mútua. A área laranja subtraída da informação mútua é a informação condicional  $H(X|Y)$  e a área azul subtraída da informação mútua é a informação condicional  $H(Y|X)$ . Por fim, todo o diagrama é a entropia conjunta  $H(X, Y)$ . **Fonte:** Autoria própria

Como já mencionado anteriormente, a matriz densidade se comporta como uma distribuição de probabilidade, logo, os quantificadores de informação clássica, mencionados acima, também são válidos para a entropia de von Neumann. Então, se  $\rho_A$  e  $\rho_B$  são matrizes densidade que descrevem dois sistemas físicos distintos, a entropia relativa de  $\rho_A$  para  $\rho_B$  é dada por (NIELSEN; CHUANG, 2002)

$$S(\rho_A||\rho_B) = \text{Tr}(\rho_A \ln(\rho_A)) - \text{Tr}(\rho_A \ln(\rho_B)), \quad (1.84)$$

sendo a Eq. (1.84) conhecida como entropia relativa quântica. Um resultado importante é que a entropia relativa quântica é sempre maior ou igual a zero, como indica o teorema abaixo, conhecido como teorema de Klein.

**Teorema 2.** (Desigualdade de Klein) *A entropia relativa quântica é não negativa,*

$$S(\rho_A||\rho_B) \geq 0, \quad (1.85)$$

*sendo a igualdade garantida se, e somente se,  $\rho_A = \rho_B$*

É importante ressaltar algumas propriedades relevantes para a entropia de von Neumann (Eq. 1.76), indexadas abaixo (NIELSEN; CHUANG, 2002):

- 1- A entropia é não negativa. A entropia só é zero se, e somente se, o estado do sistema quântico é puro.
- 2- A entropia de von Neumann assume um valor máximo de  $\ln(N)$ , onde  $N$  é a dimensão

do espaço de Hilbert. A entropia só atinge o valor máximo se o sistema quântico é completamente misto.

- 3- Se um sistema composto  $AB$  se encontra em um estado puro, então  $S(A) = S(B)$ .
- 4- Supondo um conjunto  $\{p_i\}$  de probabilidades associadas a cada estado do conjunto  $\{\rho_i\}$  que possui suporte a subespaços ortogonais, então

$$S\left(\sum_i p_i \rho_i\right) = H(p_i) + \sum_i p_i S(\rho_i). \quad (1.86)$$

- 5- (*Entropia conjunta*): Sendo  $\{p_i\}$  um conjunto de probabilidades,  $\{|a_i\rangle\}$  um conjunto ortogonal de estados para o sistema  $A$ , e  $\{\rho_i\}$  um conjunto de operadores densidade para outro sistema,  $B$ , então

$$S\left(\sum_i p_i |a_i\rangle\langle a_i| \otimes \rho_i\right) = H(p_i) + \sum_i p_i S(\rho_i). \quad (1.87)$$

Agora, definimos a entropia conjunta, onde consideramos um sistema quântico constituído de dois subsistemas  $A$  e  $B$ , sendo o operador densidade expresso como  $\rho_{AB}$ . Assim, fazendo uma analogia com a entropia de Shannon, temos (NIELSEN; CHUANG, 2002)

$$S(A, B) = -\text{Tr}(\rho_{AB} \log \rho_{AB}). \quad (1.88)$$

Definimos também a entropia condicional e informação mútua como

$$S(A|B) = S(A, B) - S(B) \quad (1.89)$$

$$\begin{aligned} S(A : B) &= S(A) + S(B) - S(A, B) \\ &= S(A) - S(A|B) = S(B) - S(B|A). \end{aligned} \quad (1.90)$$

Contudo, apesar da analogia entre a entropia de Shannon com a entropia de von Neumann, algumas propriedades da entropia clássica não são válidas para a entropia quântica. Por exemplo, a desigualdade  $H(X) \leq H(X, Y)$ , concluímos que não podemos estar mais incertos sobre o estado de  $X$  do que sobre o estado conjunto de  $X$  e  $Y$ . Porém, como vimos anteriormente, no caso do emaranhamento, saber tudo sobre as partes não nos diz tudo sobre o sistema composto.

## Capítulo II

### Termodinâmica clássica e quântica

A termodinâmica é a ciência que se dedica ao estudo dos fenômenos relacionados ao calor, trabalho e energia. Ela evoluiu ao longo de vários séculos, com as primeiras leis sendo formuladas no século XVIII por cientistas como Benjamin Thompson (também conhecido como Conde Rumford) e James Joule.

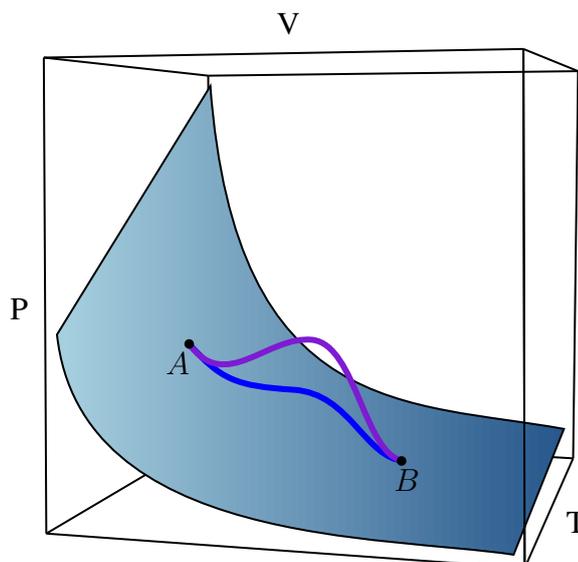
A termodinâmica clássica é baseada em cinco axiomas fundamentais, conhecidos como as leis da termodinâmica. Mesmo com o seu sucesso e universalidade, a termodinâmica é atormentada por três grandes limitações: a termodinâmica é incapaz de fornecer informações microscópicas ou estabelecer uma ligação entre sua estrutura fenomenológica e informações microscópicas; como é uma teoria de equilíbrio, então apenas processos quase estáticos podem ser descritos completamente; por ser uma teoria clássica, a estrutura matemática não pode ser aplicada diretamente a sistemas quânticos (DEFFNER; CAMPBELL, 2019). A termodinâmica clássica não tem como objetivo suprir essas limitações, e por conta disso temos a termodinâmica estocástica e a termodinâmica quântica.

Originalmente desenvolvida para descrever e entender o comportamento do calor e do trabalho em sistemas físicos. Seus principais objetivos incluíam a explicação de ciclos térmicos, como o ciclo de Carnot (CARNOT, 1860), que pode ser usado para produzir trabalho a partir de calor, e a explicação da relação entre calor e trabalho, como no caso do trabalho realizado por um gás sob pressão, descrito no experimento de Joule (Joule, 1850). A termodinâmica também foi utilizada para compreender o comportamento de motores térmicos, como os usados em veículos, e para o desenvolvimento de tecnologias de geração de energia, como usinas a vapor.

#### 2.1 Variedade termodinâmica e processos reversíveis

A variedade termodinâmica pode ser visualizada como uma superfície no espaço de estados, que contém todos os estados possíveis do sistema. Cada ponto da superfície é geralmente representado por três coordenadas, como pressão, volume e temperatura. Essa superfície é limitada pelas condições de equilíbrio do sistema, como o ponto de ebulição e o ponto de condensação de um gás. A variedade termodinâmica é uma ferramenta útil para visualizar e analisar o comportamento termodinâmico de um sistema, permitindo, por exemplo, representar as trajetórias que o sistema pode seguir durante um processo termodinâmico e calcular grandezas como entalpia e entropia.

Figura 10: Variedade termodinâmica



Variedade termodinâmica para um gás ideal com  $PV = Nk_B T$ . Uma transformação de estado reversível, ou seja, todos os pontos da linha azul estão na superfície da variedade termodinâmica, e um processo irreversível, onde parte da linha roxa se encontra fora da superfície, com os mesmos pontos iniciais e finais. **Fonte:** Deffner e Campbell (2019), com adaptações.

Os únicos processos que podem ser completamente descritos pela termodinâmica, são os processos quase-estáticos. Os processos quase-estáticos ocorrem em um tempo infinitesimal, o que resulta em um relaxamento quase que instantâneo para o equilíbrio. Isso significa que podem ser descritos como uma sucessão de estados de equilíbrio, e os caminhos correspondentes a esses processos na variedade termodinâmica são chamados de reversíveis (Fig. 10). Processos reais, que ocorrem em um tempo finito e em taxas finitas, necessariamente envolvem estados fora do equilíbrio e são descritos por caminhos na variedade termodinâmica que deixam a superfície, ou seja, são processos irreversíveis, e por isso a termodinâmica estocástica é necessária para descrever esses processos.

## 2.2 Primeira lei da termodinâmica clássica

A lei da conservação da energia, também conhecida como a primeira lei da termodinâmica, foi formulada no século XIX para compreender os processos termodinâmicos de maneira quantitativa. Ela foi inicialmente proposta por Hermann von Helmholtz em 1847, que a denominou "lei da conservação da força-viva" (HELMHOLTZ, 1847).

No entanto, foi James Joule quem deu a primeira demonstração experimental da lei da conservação de energia, através de seus experimentos envolvendo o calor gerado pelo trabalho. Além disso, Joule foi o primeiro a usar o termo "energia" para se referir à quantidade de trabalho que um sistema é capaz de realizar. Em um de seus experimentos, Joule mediu a temperatura da água em um recipiente enquanto um peso era solto de uma determinada altura, fazendo com que uma hélice imersa na água girasse. Ele comparou a temperatura da água antes e depois do

experimento e verificou que a variação na temperatura era proporcional à altura da queda do peso e à quantidade de trabalho realizada pela hélice (JOULE, 1850).

A lei da conservação de energia foi formalmente formulada por William Thomson (mais conhecido como Lord Kelvin) em 1851 (KELVIN, 1853). Kelvin definiu a energia como sendo a capacidade de um corpo para realizar trabalho e afirmou que a energia de um sistema é conservada, ou seja, não pode ser criada ou destruída. Matematicamente, a lei da conservação de energia pode ser expressa como:

$$dE = dW + dQ, \quad (2.1)$$

onde  $E$  é a energia interna do sistema,  $Q$  é o calor e  $W$  é o trabalho realizado sobre o sistema. Além disso,  $dE$  é uma diferencial exata, o que significa que as mudanças na energia interna não dependem do caminho escolhido, dependendo apenas do estado inicial e final, ou seja,  $dE$  é uma função de estado. O trabalho é uma forma de transferência de energia, ou ainda, "Trabalho é a transferência de energia que resulta de mudanças nas coordenadas generalizadas que caracterizam o sistema" (KITTEL; KROEMER, 1998). Ele é definido como a força aplicada sobre um corpo multiplicada pela distância percorrida pela força, ou seja, depende do caminho seguido pelo sistema, o que justifica o porquê de  $dW$  ser uma diferencial não exata. Podemos identificar mudanças infinitesimais no trabalho como (DEFFNER; CAMPBELL, 2019)

$$dW = -PdV. \quad (2.2)$$

O calor  $dQ$ , que também é uma diferencial não exata, é geralmente usado para descrever a transferência de energia entre um sistema termodinâmico e seu ambiente, e também, segundo Kittel e Kroemer (1998), calor é definido como a transferência de energia que acompanha uma transferência de entropia entre o sistema e seu entorno. Por exemplo, quando um sistema térmico absorve calor, ele transfere energia térmica do ambiente para si, aumentando assim a sua entropia.

Se o sistema estiver em equilíbrio térmico com o ambiente, então  $Q = 0$ . Nesse caso, a lei da conservação de energia pode ser simplificada para:

$$\Delta E = W. \quad (2.3)$$

Isso significa que, se é realizado trabalho sobre o sistema, a sua energia interna aumenta e, se o sistema realiza trabalho, a sua energia interna diminui.

## 2.3 Segunda lei da termodinâmica clássica

A segunda lei da termodinâmica é uma lei fundamental da física que estabelece as limitações da eficiência de processos térmicos. Ela afirma que o rendimento de um processo térmico é sempre menor que 100%, o que significa que haverá sempre uma perda de energia na forma de calor que não pode ser convertida em trabalho útil durante um processo térmico.

A "lei da entropia", uma das formas mais conhecidas da segunda lei da termodinâmica, afirma que a entropia de um sistema termodinâmico isolado nunca diminui. A entropia é uma medida da quantidade de desordem ou incerteza de um sistema termodinâmico. Ela é geralmente expressa como uma medida de calor por unidade de temperatura. A entropia aumenta com o aumento da temperatura e com o aumento da desordem no sistema.

Notamos na Eq. (2.2) que é possível escrever a diferencial de trabalho, que é uma diferencial não exata, em função de uma diferencial exata  $dV$ , ou seja, a necessidade de conhecer o caminho deve estar contida na pressão. No entanto, se é possível escrever  $\delta W$  dessa forma, como ficaria  $\delta Q$  escrito em termos de uma diferencial exata? Clausius (1850) percebeu que

$$\oint \frac{\delta Q}{T} \leq 0, \quad (2.4)$$

onde  $\delta Q$  é a quantidade infinitesimal de calor trocada pelo sistema e  $T$  é a temperatura absoluta a qual o calor é trocado. A desigualdade na Eq. (2.4) se torna uma igualdade para processos quase-estáticos. Dessa forma, parece natural definir uma nova função de estado,  $S$ , para processos reversíveis por meio de

$$dS \equiv \frac{\delta Q}{T}, \quad (2.5)$$

onde  $dS$  é a variação infinitesimal da entropia do sistema.

Imagine que a Figura (10) representa um processo termodinâmico que leva o sistema de um ponto A para um ponto B através da linha roxa, ou seja, um processo irreversível. Em seguida, o sistema retorna pelo caminho azul, de forma reversível, do ponto B para o ponto A, fechando o ciclo. Observe que o ciclo como um todo é um processo irreversível, já que uma parte do ciclo é irreversível. Podemos representar esse ciclo da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \oint \frac{\delta Q}{T} &\leq 0 \\ \Rightarrow \int_{I,A}^B \frac{\delta Q}{T} + \int_{R,B}^A \frac{\delta Q}{T} &\leq 0 \\ \Rightarrow \int_{I,A}^B \frac{\delta Q}{T} - \Delta S_{A \rightarrow B} &\leq 0 \\ \Rightarrow \Delta S_{A \rightarrow B} &\geq \int_A^B \frac{\delta Q}{T}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

onde os subscritos  $I$  e  $R$  se referem aos processos irreversíveis e reversíveis, respectivamente. A igualdade na última linha só é válida para o caso de a integral à direita da equação ser reversível. A última equação é conhecida como a desigualdade de Clausius. Concluímos que, para um sistema isolado, a entropia do sistema aumenta para processos irreversíveis, e se mantém constante para processos reversíveis.

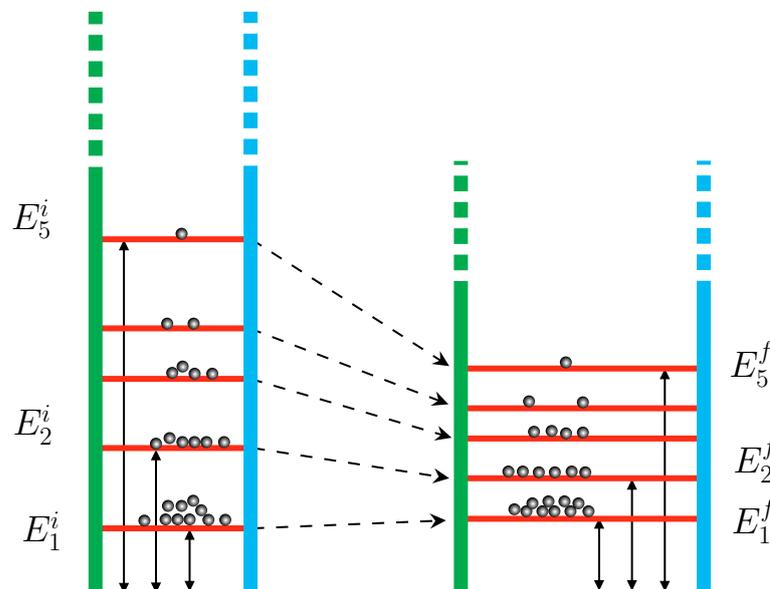
A desigualdade de Clausius estabelece que, durante qualquer processo termodinâmico, a variação da entropia de um sistema é sempre maior ou igual à quantidade de calor trocada pelo sistema dividida pela temperatura absoluta a qual o calor é trocado. Isso quer dizer

que, se um sistema recebe calor a uma temperatura absoluta  $T$ , sua entropia aumentará pelo menos em  $Q/T$ . Essa desigualdade é importante porque ajuda a compreender o comportamento termodinâmico de sistemas e a medir o grau de irreversibilidade de um processo.

## 2.4 Primeira lei da termodinâmica quântica

A termodinâmica clássica e suas leis foram formuladas experimentalmente e são eficazes em descrever fenômenos em escala clássica, mas falham ao serem aplicadas a sistemas com uma quantidade significativamente menor de partículas devido às flutuações térmicas. A termodinâmica estocástica, por sua vez, é uma ramificação da termodinâmica que trata de sistemas fora de equilíbrio, ou seja, sistemas que trocam constantemente energia com o ambiente, e é especialmente útil para compreender o comportamento de sistemas microscópicos, como moléculas, que estão em constante movimento e interagindo com o ambiente. Quando se trata de estudar sistemas com uma quantidade ainda menor de constituintes, além de levar em consideração flutuações térmicas, é necessário considerar também efeitos quânticos, que são indispensáveis para descrever fenômenos nesta escala. Para essas situações, a termodinâmica quântica foi desenvolvida para estudar os fenômenos termodinâmicos no regime quântico, mantendo a simplicidade das leis da termodinâmica clássica (BERNARDO, 2020).

Figura 11: Diagrama de um sistema quântico multi-nível



Evolução de um poço quadrado, no qual as energias inicialmente são  $E_n^i$ , e após a evolução, o tamanho da caixa aumenta e os níveis de energia diminuem para  $E_n^f$ . **Fonte:** Quan et al. (2007), com adaptações.

Vamos considerar um sistema quântico arbitrário com um número finito de níveis de energia, como na Fig. (11). O hamiltoniano desse sistema é dado por:

$$\hat{H} = \sum_n E_n |n\rangle\langle n|, \quad (2.7)$$

onde  $|n\rangle$  é o  $n$ -ésimo estado próprio do sistema e  $E_n = \langle n|\hat{H}|n\rangle$  é o respectivo autovalor. Podemos definir a energia interna do sistema como a média de  $\hat{H}$

$$U = \langle \hat{H} \rangle = \text{Tr}(\rho \hat{H}) = \sum_n P_n E_n, \quad (2.8)$$

sendo  $\rho$  o operador densidade do sistema, e  $P_n = \langle n|\rho|n\rangle$  é a probabilidade de o sistema estar no  $n$ -ésimo estado. Tomando a diferencial da Eq. (2.8), encontramos

$$dU = \sum_n [E_n dP_n + P_n dE_n], \quad (2.9)$$

e, ao comparar com a Eq. (2.1), podemos identificar os termos como

$$dW = \sum_n P_n dE_n \quad (2.10)$$

$$dQ = \sum_n E_n dP_n. \quad (2.11)$$

A Eq (2.10) foi identificada a partir da definição de trabalho como a transferência de energia que resulta em alterações nas coordenadas generalizadas que caracterizam o sistema, de acordo com Kittel e Kroemer (1998). Isso faz sentido ao observarmos a Fig. (11), na qual podemos ver que a variação de energia está associada à largura da caixa. Já a Eq. (2.11) é associada à definição de calor como a transferência de energia que acompanha uma transferência de entropia entre o sistema e o ambiente (KITTEL; KROEMER, 1998). Nesse sistema, onde o hamiltoniano e a matriz densidade comutam, ou seja,  $[\hat{H}, \rho] = 0$ , a entropia é dada por  $S = -k_B \sum_n P_n \ln(P_n)$ , onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann, então o calor está efetivamente associado a uma variação nas probabilidades de ocupação dos níveis de energia (QUAN et al., 2007).

Consideremos um processo isotérmico de um sistema quântico em equilíbrio térmico com um banho térmico à temperatura  $T$ . De acordo com a mecânica estatística, o estado do sistema é descrito pelo operador de densidade de Gibbs (RIBEIRO; LANDI; SEMIÃO, 2016)

$$\rho_{th} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{Z} = \sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} |n\rangle\langle n|, \quad (2.12)$$

sendo  $Z = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}})$  a função de partição e  $\beta = 1/k_B T$ . A probabilidade de encontrar o sistema no estado  $|n\rangle$  é dado por

$$P_n = \langle n|\rho_{th}|n\rangle = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}. \quad (2.13)$$

Vamos analisar  $dW$  e mostrar que podemos relacionar com a energia livre do sistema que

pode ser encontrada pela expressão  $F = U - TS$ , logo

$$\begin{aligned}
 F &= \sum_n E_n P_n - T \left( - \sum_n k_B P_n \ln(P_n) \right) \\
 &= \sum_n E_n P_n + \sum_n T k_B P_n (\ln(e^{-\beta E_n}) - \ln(Z)) \\
 &= \sum_n E_n P_n - \sum_n T k_B P_n \beta E_n - \sum_n T k_B P_n \ln(Z) \\
 &= \sum_n E_n P_n - \sum_n E_n P_n - T k_B \ln(Z) \\
 &= -T k_B \ln(Z),
 \end{aligned} \tag{2.14}$$

tomando sua diferencial,  $dF = -k_B T dZ/Z = \sum_n P_n dE_n$ , concluímos então que

$$dW = dF, \tag{2.15}$$

que condiz com o resultado clássico para uma transformação isotérmica, reforçando que de fato, a Eq. (2.10) é uma boa definição para trabalho.

Explorando  $dQ$ , podemos reescrever a Eq. (2.13) como  $E_n = -k_B T \ln(Z P_n)$ , que substituindo na Eq. (2.11) nos dá

$$\begin{aligned}
 dQ &= \sum_n -k_B T \ln(Z P_n) dP_n \\
 &= -k_B T \left[ \left( \sum_n \ln Z dP_n \right) + \left( \sum_n \ln(P_n) dP_n \right) \right] \\
 &= -k_B T \left[ \left( \ln Z d \left( \sum_n P_n \right) \right) + \left( \sum_n \ln(P_n) dP_n \right) \right] \\
 &= -k_B T \sum_n \ln(P_n) dP_n,
 \end{aligned} \tag{2.16}$$

tomando a diferencial da entropia, encontramos

$$\begin{aligned}
 dS &= d \left( -k_B \sum_n P_n \ln(P_n) \right) \\
 &= -k_B \left[ \sum_n \frac{P_n}{P_n} dP_n + \sum_n \ln(P_n) dP_n \right] \\
 &= -k_B \sum_n \ln(P_n) dP_n,
 \end{aligned} \tag{2.17}$$

dessa forma, concluímos que

$$dQ = T dS, \tag{2.18}$$

o que condiz também com o resultado clássico.

É importante ressaltar que esses resultados são válidos apenas para processos quase-

estáticos e reversíveis. Além disso, para chegar à Eq. (2.18), foi considerada a entropia escrita como  $S = -k_B \sum_n P_n \ln(P_n)$ , o que só é possível se o operador densidade comutar com o hamiltoniano. Uma formulação mais geral e mais completa da definição da primeira lei da termodinâmica será discutida adiante.

### 2.4.1 A primeira lei a partir de definição clássica de calor

Nesta seção, será discutido um conceito ampliado de calor que considera a entropia de von Neumann, conforme expressa na Eq. (1.76) (BERNARDO, 2020). Isso dispensa a necessidade de a matriz densidade comutar com o hamiltoniano. Iniciamos ao considerar a energia interna do sistema descrita pela Eq. (2.8). Ao invés de calcular o traço na base dos autoestados de energia,  $|n\rangle$ , será utilizada a base dos autoestados do operador densidade,  $|k\rangle$ , sendo o operador densidade dado por  $\rho = \sum_k \rho_k |k\rangle\langle k|$ :

$$U = \langle \hat{H} \rangle = \text{Tr}(\rho \hat{H}) = \sum_k \rho_k \epsilon_k, \quad (2.19)$$

com  $\epsilon_k = \langle k | \hat{H} | k \rangle$  os elementos da diagonal de  $\hat{H}$  representado na base dos autoestados da matriz densidade  $\{|k\rangle\}$ .

Observe que a Eq. (2.19) é equivalente à Eq. (2.8), pois a operação traço é independente da base escolhida. Tomando a diferencial de  $U$ , temos

$$dU = \sum_k [\epsilon_k d\rho_k + \rho_k d\epsilon_k], \quad (2.20)$$

a entropia de von Neumann para esse sistema dada por  $S = -k_B \text{Tr}(\rho \log(\rho)) = -k_B \sum_k \rho_k \log(\rho_k)$ , e sua diferencial é dada por

$$\begin{aligned} dS &= -k_B \left[ \sum_k \frac{\rho_k}{\rho_k} d\rho_k + \sum_k \log(\rho_k) d\rho_k \right] \\ &= -k_B \sum_k \log(\rho_k) d\rho_k. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Notamos que, para que haja variação de entropia, necessariamente tem que haver variação nos autovalores da matriz densidade, logo  $dS \neq 0$  se, e somente se,  $d\rho_k \neq 0$ . Lembrando que o calor é a transferência de energia que acompanha uma variação de entropia. Dessa forma, ao observar a Eq. (2.20), podemos identificar o trabalho e o calor como:

$$d\mathcal{W} = \sum_k \rho_k d\epsilon_k \quad (2.22)$$

$$d\mathcal{Q} = \sum_k \epsilon_k d\rho_k. \quad (2.23)$$

As equações (2.22) e (2.23) nos permitem escrever uma versão quântica da primeira lei

como  $dU = dW + dQ$ .

Analisando um processo isotérmico, como feito anteriormente, que utiliza o operador de densidade descrito na equação (2.12), e aplicando o mesmo procedimento para estabelecer a relação entre a energia livre e o trabalho, e a entropia e o calor, obtemos os mesmos resultados, onde  $dW = dF$  e  $dQ = TdS$ . Isso ocorre pois ao longo de toda a transformação, o estado térmico, dado pela Eq. (2.12), permanece diagonal tanto na base  $|n\rangle$  quanto na base  $|k\rangle$ . Neste caso, as definições de trabalho e calor são equivalentes nas duas perspectivas.

## 2.4.2 O papel da coerência

As duas abordagens de trabalho e calor apresentadas anteriormente mostraram ser equivalentes em um processo isotérmico descrito pelo operador densidade de Gibbs. Contudo é preciso verificar se essa equivalência é válida em um processo quântico geral.

Vamos examinar se há similaridade entre as definições de trabalho mencionadas anteriormente. Podemos reformular a equação (2.10) como:

$$\begin{aligned} dW &= \sum_n P_n dE_n \\ &= \sum_n \langle n | \left( \sum_k \rho_k |k\rangle \langle k| \right) |n\rangle dE_n \\ &= \sum_n \sum_k \rho_k |c_{n,k}|^2 dE_n, \end{aligned} \quad (2.24)$$

sendo  $c_{n,k} = \langle n | k \rangle$ . Agora, analisando a  $dW$ , ficamos com

$$\begin{aligned} dW &= \sum_k \rho_k d\epsilon_k \\ &= \sum_k \rho_k d \left[ \langle k | \left( \sum_n E_n |n\rangle \langle n| \right) |k\rangle \right] \\ &= \sum_k \rho_k d \left[ \sum_n E_n |c_{n,k}|^2 \right] \\ &= \sum_n \sum_k \rho_k |c_{n,k}|^2 dE_n + \sum_n \sum_k \rho_k E_n d[|c_{n,k}|^2] \\ &= dW + d\mathcal{C}, \end{aligned} \quad (2.25)$$

onde, na última linha, foi definido  $d\mathcal{C}$  como

$$d\mathcal{C} = \sum_n \sum_k \rho_k E_n d[|c_{n,k}|^2], \quad (2.26)$$

onde  $\mathcal{C}$  é a chamada *energia coerente* (BERNARDO, 2021), que será abordada com mais detalhes adiante. Ao comparar as duas expressões para calor, é possível reformular a equação (2.23) como

$$\begin{aligned}
\dot{d}Q &= \sum_k \epsilon_k d\rho_k \\
&= \sum_k \langle k| \left( \sum_n E_n |n\rangle \langle n| \right) |k\rangle d\rho_k \\
&= \sum_n \sum_k E_n |c_{n,k}|^2 d\rho_k.
\end{aligned} \tag{2.27}$$

Da mesma forma, a Eq. (2.11) fica

$$\begin{aligned}
\dot{d}Q &= \sum_n E_n dP_n \\
&= \sum_n E_n d \left[ \langle n| \left( \sum_k \rho_k |k\rangle \langle k| \right) |n\rangle \right] \\
&= \sum_n E_n d \left[ \sum_k \rho_k |c_{n,k}|^2 \right] \\
&= \sum_n \sum_k E_n |c_{n,k}|^2 d\rho_k + \sum_n \sum_k \rho_k E_n d [|c_{n,k}|^2] \\
&= \dot{d}Q + \dot{d}\mathcal{C}.
\end{aligned} \tag{2.28}$$

A análise mostra que, em um processo quântico geral, as duas definições da primeira lei da termodinâmica não são equivalentes. A diferença está no fato de que o formalismo apresentado com base nas equações (2.10) e (2.11) considera implicitamente  $\dot{d}\mathcal{C}$  somente como calor, enquanto o formalismo demonstrado por Bernardo (2020) nas equações (2.22) e (2.23) considera implicitamente como trabalho. Observando a Eq. (2.26), verificamos que não há relação com variações nos autovalores do hamiltoniano ou dos autovalores da matriz densidade, o que nos impede de classificá-lo como trabalho ou calor. Mas há uma relação com a variação das direções dos vetores da base  $|k\rangle$  do operador densidade em relação aos vetores da base  $|n\rangle$  do hamiltoniano representado pela quantidade.

A coerência de um sistema quântico está relacionada com os elementos fora da diagonal principal, conforme destacado em estudos como os apresentados em (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014; GIROLAMI; TUFARELLI; ADESSO, 2013). Consequentemente, a variação temporal na coerência do sistema está relacionada à variação temporal do termo  $|c_{n,k}(t)|^2 = |\langle n(t)|k(t)\rangle|^2$ , que está relacionado aos termos fora da diagonal principal.

A contribuição da dinâmica da coerência ao longo do tempo em um processo quântico finito é obtida através da integração da Eq. (2.26),

$$\mathcal{C}(t) = \sum_n \sum_k \int_0^t (E_n \rho_k) \frac{d}{dt'} |c_{n,k}|^2 dt'. \tag{2.29}$$

A partir das definições de trabalho quântico e calor, derivadas diretamente de seus conceitos clássicos originais, nas equações (2.10) e (2.23), é possível calcular a dependência temporal dessas quantidades em um processo quântico finito através de uma integração,

$$W(t) = \sum_n \sum_k \int_0^t \rho_k |c_{n,k}|^2 \frac{dE_n}{dt'} dt', \quad (2.30)$$

$$Q(t) = \sum_n \sum_k \int_0^t E_n |c_{n,k}|^2 \frac{d\rho_k}{dt'} dt', \quad (2.31)$$

Além disso, como a  $\mathcal{C}$  não tem um equivalente clássico como o  $W$  e o  $Q$ , por conta disso, foi proposto por Bernardo (2020) uma reformulação da primeira lei da termodinâmica quântica como

$$dU = dW + dQ + d\mathcal{C}. \quad (2.32)$$

Ao combinar as equações (2.29), (2.30) e (2.31), obtemos a variação da energia interna do sistema, que é dada por:

$$\Delta U(t) = \sum_n \sum_k \int_0^t \frac{d}{dt'} (E_n \rho_k |c_{n,k}|^2) dt'. \quad (2.33)$$

Podemos interpretar a energia coerente  $\mathcal{C}$  como a transferência de energia para um sistema acompanhado por mudança de coerência, logo, podemos dizer que a energia coerente envolvida em um processo quântico depende da coerência inicial do sistema e da natureza da interação com o ambiente (BERNARDO, 2020).

Nessa formulação, as equações para a energia interna de um sistema quântico foram derivadas com base na ideia de que a energia interna é equivalente à média da sua energia, proposta originalmente por Alicki (1979). Isso significa que as equações representam as contribuições médias de energia coerente, trabalho e calor para a mudança na energia interna do sistema quântico, definidas quando um grande número de realizações de um protocolo de transformação é feito em um conjunto de sistemas individuais igualmente preparados (BERNARDO, 2020).

## Capítulo III

### Sistema quântico acoplado com o ambiente

Este capítulo tem como objetivo compreender e analisar o caso em que um sistema quântico de dois níveis interage com um ambiente térmico. Serão aplicados os conceitos apresentados ao longo deste trabalho para descrever quantidades como calor, trabalho, energia coerente, entropia, dentre outros. Além disso, serão discutidas perspectivas de aplicação do presente formalismo em estudos futuros.

#### 3.1 Regime de acoplamento

A termodinâmica microscópica possui características distintivas, uma delas é o acoplamento forte entre sistema e ambiente. Quando se trata de um sistema macroscópico tridimensional, as interações entre sistema e ambiente geralmente ocorrem em sua superfície bidimensional e envolvem apenas uma pequena fração de seus átomos, fazendo com que o valor da energia de interação entre eles seja insignificante em comparação com a energia interna do sistema de interesse. Isso permite que a energia total do sistema composto seja aproximada como uma soma das energias dos subsistemas, ou seja,  $H_{S+E} \approx H_S + H_E$ , o que leva diretamente à noção de energia térmica perdida pelo ambiente é ganha pelo sistema e vice-versa.

Porém, para sistemas microscópicos de interesse, a energia de interação não pode ser descartada facilmente, uma vez que a "superfície" do sistema pode incluir a maioria ou todos os seus graus de liberdade. Nesse caso, é necessário escrever a energia total do sistema composto como a soma da energia do sistema de interesse, da energia do ambiente e da energia de interação entre eles. Essa abordagem permite que a energia de interação seja comparável à energia do sistema de interesse (JARZYNSKI, 2017). Dessa forma não podemos afirmar que toda energia térmica perdida pelo sistema será ganha pelo ambiente, já que devemos levar em conta a contribuição da interação, então devemos escrever a energia do sistema composto como  $H_{S+E} = H_S + H_E + H_{SE}$ , onde  $H_{SE}$  é a energia de interação.

#### 3.2 Modelo físico

Neste estudo, analisamos um sistema atômico de dois níveis  $\mathcal{S}$  interagindo com um ambiente com um número finito de estados, que inicialmente se encontra em estado térmico. Os estados fundamental e excitado do sistema são representados por  $|g\rangle$  e  $|e\rangle$ , com energias  $E_g$  e  $E_e$ ,

respectivamente. O hamiltoniano do sistema é dado por

$$\hat{H}_S = E_g|g\rangle\langle g| + E_e|e\rangle\langle e|. \quad (3.1)$$

Embora o ambiente possua  $d + 1$  estados, apenas os estados  $|E_0\rangle$  e  $|E_1\rangle$  têm capacidade de afetar o sistema  $S$ , através da troca de fótons ressonantes. O ambiente possui o hamiltoniano dado por

$$\hat{H}_E = \sum_{i=0}^d E_i|E_i\rangle\langle E_i|, \quad (3.2)$$

e estado térmico inicial

$$\rho_E(0) = \frac{e^{-\beta\hat{H}_E}}{\mathcal{Z}_E}, \quad (3.3)$$

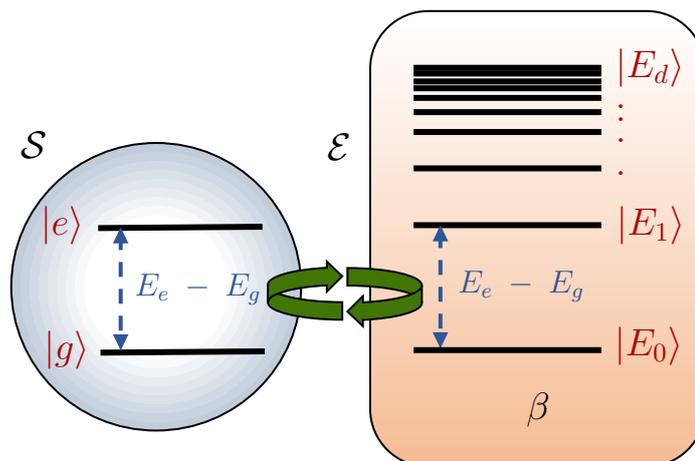
com  $\mathcal{Z}_E = \text{Tr}(e^{-\beta\hat{H}_E})$  sendo a função de partição  $\beta = 1/k_B T$ . A Fig. (12) representa o modelo.

Como estamos assumindo que apenas os estados  $|E_0\rangle$  e  $|E_1\rangle$  do ambiente  $\mathcal{E}$  são capazes de influenciar nos estados do sistema  $S$ , então podemos representar o ambiente como um qubit  $E$ , com estado inicial

$$\begin{aligned} \rho_E(0) &= \frac{e^{-\beta E_0}}{\mathcal{Z}_E}|E_0\rangle\langle E_0| + \frac{e^{-\beta E_1}}{\mathcal{Z}_E}|E_1\rangle\langle E_1| \\ &= w_0|E_0\rangle\langle E_0| + w_1|E_1\rangle\langle E_1|, \end{aligned} \quad (3.4)$$

sendo  $w_0 = \frac{e^{-\beta E_0}}{\mathcal{Z}_E}$  e  $w_1 = \frac{e^{-\beta E_1}}{\mathcal{Z}_E}$ , logo  $\mathcal{Z}_E = \frac{e^{-\beta E_0}}{w_0} = \frac{e^{-\beta E_1}}{w_1}$ , então  $w_1 = w_0 e^{-\beta(E_1 - E_0)}$ . Como  $w_0$  e  $w_1$  são pesos probabilísticos, devem respeitar a relação  $w_0 + w_1 = 1$ . Além disso, a Fig (12) mostra que  $E_1 - E_0 = E_e - E_g$ .

Figura 12: Representação gráfica do modelo físico



A imagem ilustra um sistema atômico de dois níveis  $S$  à esquerda e, à direita, um ambiente  $\mathcal{E}$  com  $d + 1$  níveis, inicialmente no estado térmico. **Fonte:** Bernardo (2021)

A dinâmica da interação é determinada pelas seguintes condições iniciais (BERNARDO, 2021): se o sistema  $S$  se encontra no estado fundamental  $|g\rangle$  e o ambiente  $E$  se encontra no

estado fundamental  $|E_0\rangle$ , então não há dinâmica e o estado final é igual ao estado inicial. Caso o sistema  $\mathcal{S}$  esteja no estado fundamental e o ambiente  $E$  esteja no estado excitado  $|E_1\rangle$ , então, após um tempo  $\tau$ , há uma probabilidade  $p$  de que o ambiente decaia para o estado fundamental e o sistema fique no estado excitado  $|e\rangle$ , e uma probabilidade  $1 - p$  de que nada ocorra. Se o sistema está no estado excitado  $|e\rangle$  e o ambiente está no estado fundamental, então, após um tempo  $\tau$ , há uma probabilidade  $p$  de que o sistema decaia para o estado fundamental  $|g\rangle$  e o ambiente é levado para o primeiro estado excitado  $|E_1\rangle$ , e uma probabilidade  $1 - p$  de que nada ocorra. Por fim, se ambos, o sistema e o ambiente, se encontram no estado excitado, então, após um tempo  $\tau$ , não se espera que ocorra nenhuma transição. Essa dinâmica é resultado do *generalized amplitude-damping channel* (GADC), que é uma versão generalizada do canal de amortecimento de amplitude, apresentado na seção 1.6.4. A dinâmica está representada no diagrama abaixo.

$$\begin{aligned} |g, E_0\rangle &\longrightarrow |g, E_0\rangle, \\ |g, E_1\rangle &\longrightarrow \sqrt{1-p}|g, E_1\rangle - \sqrt{p}|e, E_0\rangle, \\ |e, E_0\rangle &\longrightarrow \sqrt{1-p}|e, E_0\rangle + \sqrt{p}|g, E_1\rangle, \\ |e, E_1\rangle &\longrightarrow |e, E_1\rangle. \end{aligned}$$

Conhecendo a dinâmica, podemos determinar a matriz evolução temporal  $\hat{U}$  que descreve a evolução do conjunto sistema-ambiente  $\mathcal{SE}$ :

$$\hat{U} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p} & \sqrt{p} & 0 \\ 0 & -\sqrt{p} & \sqrt{1-p} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.5)$$

Inicialmente, considerando que o sistema  $\mathcal{S}$  e o ambiente  $E$  estão descorrelacionados, podemos representar o sistema composto como o produto tensorial entre o estado do sistema e o estado do ambiente, como  $\rho_{SE}(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_E(0)$ . Para descrever a evolução do sistema  $\mathcal{S}$ , utilizamos o canal quântico, como o descrito na equação (1.38), que leva o estado inicial de  $\rho_S(0)$  para o estado final  $\Phi[\rho_S(0)] = |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|$ . Mas para isso, definimos o sistema em um estado puro  $|\psi(0)\rangle = \alpha|g\rangle + \sqrt{1-\alpha^2}|e\rangle$ , onde  $\alpha \in \mathbb{R}$ . Assim,  $\Phi[\rho_S(0)]$  é dado por

$$\begin{aligned} \Phi[\rho_S(0)] &= \text{Tr}_E \left( \hat{U}(\rho_S(0) \otimes \rho_E(0))\hat{U}^\dagger \right) \\ &= \sum_i \sum_j \hat{K}_{ij} \rho_S(0) \hat{K}_{ij}^\dagger, \end{aligned} \quad (3.6)$$

sendo os operadores de Kraus  $K_{ij}$

$$\begin{aligned}
\hat{K}_{00} &= \sqrt{w_0}(|g\rangle\langle g| + \sqrt{1-p}|e\rangle\langle e|) = \begin{bmatrix} \sqrt{w_0} & 0 \\ 0 & \sqrt{w_0}\sqrt{1-p} \end{bmatrix}, \\
\hat{K}_{01} &= \sqrt{w_0}(\sqrt{p}|g\rangle\langle e|) = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{w_0}\sqrt{p} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \\
\hat{K}_{10} &= -\sqrt{w_1}(\sqrt{p}|e\rangle\langle g|) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -\sqrt{w_1}\sqrt{p} & 0 \end{bmatrix}, \\
\hat{K}_{11} &= \sqrt{w_1}(\sqrt{1-p}|g\rangle\langle g| + |e\rangle\langle e|) = \begin{bmatrix} \sqrt{w_1}\sqrt{1-p} & 0 \\ 0 & \sqrt{w_1} \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Com isso, podemos calcular o resultado da Eq. (3.6)

$$\begin{aligned}
\Phi[\rho_S(0)] &= \hat{K}_{00}\rho_S\hat{K}_{00}^\dagger + \hat{K}_{01}\rho_S\hat{K}_{01}^\dagger + \hat{K}_{10}\rho_S\hat{K}_{10}^\dagger + \hat{K}_{11}\rho_S\hat{K}_{11}^\dagger \\
&= \begin{bmatrix} pw_0 + \alpha^2(1-p)(w_0 + w_1) & \alpha\sqrt{1-\alpha^2}\sqrt{1-p}(w_0 + w_1) \\ \alpha\sqrt{(1-\alpha^2)\sqrt{(1-p)}}(w_0 + w_1) & -pw_0 + [(1-\alpha^2) + \alpha^2p](w_0 + w_1) \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \alpha^2 + p(w_0 - \alpha^2) & \alpha\sqrt{1-\alpha^2}\sqrt{1-p} \\ \alpha\sqrt{1-\alpha^2}\sqrt{1-p} & 1 - [\alpha^2 + p(w_0 - \alpha^2)] \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.8}$$

Da mesma forma, analisaremos o canal quântico que leva o estado inicial  $\rho_E(0)$  para o estado final  $\Lambda[\rho_E(0)]$ . Como o estado inicial do sistema é puro, os operadores de Kraus na base do ambiente será  $\hat{L}_k$ , como demonstrado abaixo

$$\begin{aligned}
\Lambda[\rho_E(0)] &= \text{Tr}_S \left( \hat{U}(\rho_S(0) \otimes \rho_E(0))\hat{U}^\dagger \right) \\
&= \sum_k \hat{L}_k \rho_E(0) \hat{L}_k^\dagger,
\end{aligned} \tag{3.9}$$

onde

$$\begin{aligned}
\hat{L}_0 &= \alpha|E_0\rangle\langle E_0| + \sqrt{1-\alpha^2}\sqrt{p}|E_1\rangle\langle E_0| + \alpha\sqrt{1-p}|E_1\rangle\langle E_1| \\
&= \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ \sqrt{1-\alpha^2}\sqrt{p} & \alpha\sqrt{1-p} \end{bmatrix}, \\
\hat{L}_1 &= \sqrt{1-\alpha^2}\sqrt{1-p}|E_0\rangle\langle E_0| - \alpha\sqrt{p}|E_0\rangle\langle E_1| + \sqrt{1-\alpha^2}|E_1\rangle\langle E_1| \\
&= \begin{bmatrix} \sqrt{1-\alpha^2}\sqrt{p} & -\alpha\sqrt{p} \\ 0 & \sqrt{1-\alpha^2} \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.10}$$

Dessa forma encontramos  $\Lambda[\rho_E(0)]$  como

$$\begin{aligned}
\Lambda[\rho_E(0)] &= \hat{L}_0 \rho_E \hat{L}_0^\dagger + \hat{L}_1 \rho_E \hat{L}_1^\dagger \\
&= \begin{bmatrix} (1-p)w_0 + (\alpha^2 p)(w_0 + w_1) & \alpha\sqrt{1-\alpha^2}\sqrt{p}(w_0 - w_1) \\ \alpha\sqrt{1-\alpha^2}\sqrt{p}(w_0 - w_1) & w_1 + pw_0 - \alpha^2 p(w_0 + w_1) \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} w_0 - p(w_0 - \alpha^2) & \alpha\sqrt{1-\alpha^2}\sqrt{p}(w_0 - w_1) \\ \alpha\sqrt{1-\alpha^2}\sqrt{p}(w_0 - w_1) & 1 - [w_0 - p(w_0 - \alpha^2)] \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.11}$$

As evoluções temporais do sistema  $\mathcal{S}$  e do ambiente  $E$  são descritas considerando a probabilidade de uma transição quântica por unidade de tempo  $\Gamma$ , de forma que  $p = \Gamma\Delta t \ll 1$  para um curto período de tempo  $\Delta t$ . As evoluções do sistema e do ambiente após um tempo  $t = n\Delta t$  são dadas pela aplicação sucessiva do mapa  $n$  vezes, ou seja,  $\rho_S(t) = \Phi^n[\rho_S(0)]$  e  $\rho_E(t) = \Lambda^n[\rho_E(0)]$ . Com isso a probabilidade de manutenção dos estados passa valer para todas as  $n$  aplicações. Dessa forma  $(1-p)$  passa a ser  $(1-p)^n = (1-\Gamma\Delta t)^n = (1-\frac{\Gamma t}{n})^n$ , sendo que, para  $n$  tendendo a infinito, podemos utilizar o limite fundamental exponencial, de tal forma que  $\lim_{n \rightarrow \infty} (1-\frac{\Gamma t}{n})^n = e^{-\Gamma t}$ , logo  $p = (1 - e^{-\Gamma t})$ . Dessa forma podemos reescrever as equações (3.8) e (3.11) como

$$\rho_S(t) = \begin{bmatrix} \alpha^2 + (1 - e^{-\Gamma t})(w_0 - \alpha^2) & \alpha\sqrt{1-\alpha^2}\sqrt{e^{-\Gamma t}} \\ \alpha\sqrt{1-\alpha^2}\sqrt{e^{-\Gamma t}} & 1 - [\alpha^2 + (1 - e^{-\Gamma t})(w_0 - \alpha^2)] \end{bmatrix}, \tag{3.12}$$

$$\rho_E(t) = \begin{bmatrix} w_0 - (1 - e^{-\Gamma t})(w_0 - \alpha^2) & \alpha\sqrt{1-\alpha^2}\sqrt{1 - e^{-\Gamma t}}(w_0 - w_1) \\ \alpha\sqrt{1-\alpha^2}\sqrt{1 - e^{-\Gamma t}}(w_0 - w_1) & 1 - [w_0 - (1 - e^{-\Gamma t})(w_0 - \alpha^2)] \end{bmatrix}. \tag{3.13}$$

Notamos na Eq. (3.12) que na diagonal secundária não há termos relacionados com a matriz densidade do ambiente  $E$ , ou seja, esses termos tendem a diminuir com o tempo, mostrando que a coerência do sistema decresce a uma taxa que, em princípio, independente da temperatura do ambiente.

### 3.2.1 Termodinâmica do modelo

Com base nos operadores densidade do sistema e do ambiente, bem como dos seus respectivos hamiltonianos, podemos calcular os autovalores e autovetores. Isso nos permite encontrar as propriedades termodinâmicas durante o processo de interação através das equações (2.29) a (2.31) vistas na seção 2.4 do capítulo II. Para realizar esses cálculos, definiremos os valores dos parâmetros  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $w_0$  e  $w_1$ . Como observado nas equações (3.12) e (3.13), quando  $\alpha = 0$  e 1, as diagonais secundárias se anulam, ou seja, não há variação de coerência. Portanto, é interessante defini-lo como  $\alpha = 1/\sqrt{2}$ , também consideramos  $\beta = 1/(E_e - E_g)$ ,  $w_0 \approx 0,73$  e consequentemente,  $w_1 \approx 0,27$ . Dessa forma, os autovalores encontrados para  $\Phi[\rho_S(t)]$  foram:

$$\rho_0(t) \approx \frac{1}{2}(1 - \Omega_\rho), \quad (3.14)$$

$$\rho_1(t) \approx \frac{1}{2}(1 + \Omega_\rho), \quad (3.15)$$

sendo  $\Omega_\rho = e^{-t}\sqrt{e^t + 0, 21(1 - e^t)^2}$ , e autovetores

$$|k_0(t)\rangle \approx \frac{e^{\frac{-t}{2}}\chi_0|g\rangle + |e\rangle}{\sqrt{1 + e^{-t}\chi_0^2}}, \quad (3.16)$$

$$|k_1(t)\rangle \approx \frac{e^{\frac{-t}{2}}\chi_1|g\rangle + |e\rangle}{\sqrt{1 + e^{-t}\chi_1^2}}, \quad (3.17)$$

onde  $\chi_0 = 0, 46(e^t - 1) - \Omega_\rho$  e  $\chi_1 = 0, 46(e^t - 1) + \Omega_\rho$ . Para  $\Lambda[\rho_E(t)]$ , encontramos os autovalores

$$\lambda_0(t) \approx \frac{1}{2}(1 - e^{-t}\Omega_\lambda), \quad (3.18)$$

$$\lambda_1(t) \approx \frac{1}{2}(1 + e^{-t}\Omega_\lambda), \quad (3.19)$$

com  $\Omega_\lambda = \sqrt{0, 21(1 - e^{-t} + e^{2t})}$ , e autovetores

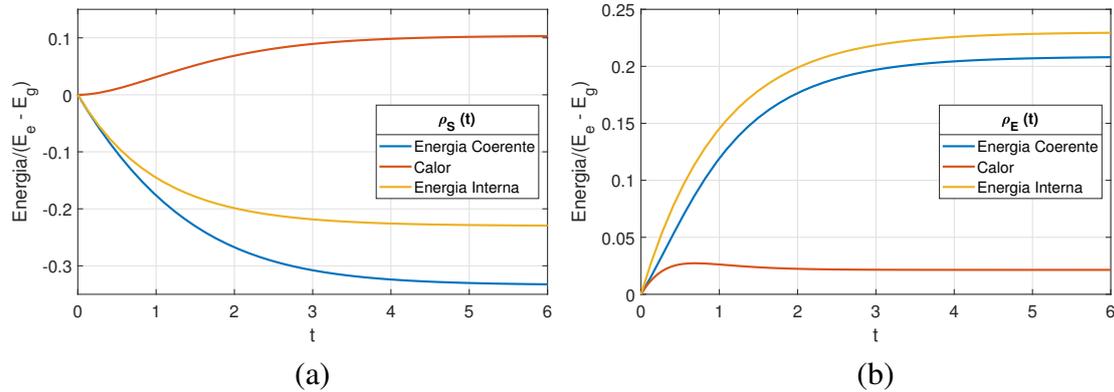
$$|l_0(t)\rangle \approx \frac{e^{-t}(\Omega_\lambda - 1)|E_0\rangle + \sqrt{1 - e^{-t}}|E_1\rangle}{\delta}, \quad (3.20)$$

$$|l_1(t)\rangle \approx \frac{e^{-t}(\Omega_\lambda + 1)|E_0\rangle + \sqrt{1 - e^{-t}}|E_1\rangle}{\delta}, \quad (3.21)$$

onde  $\delta = \sqrt{(1 - e^{-t})(1 + (e^t - 1)^{-1}(4, 73e^{-t}(0, 46 + \Omega_\lambda)^2))}$ .

Conforme observado nos hamiltonianos tanto do sistema quanto do ambiente, os seus autovalores são independentes do tempo. Com isso, utilizando a equação (2.30), concluímos que  $W_S(t) = W_E(t) = 0$ . Além disso, as figuras (13.a) e (13.b) mostram a evolução do calor trocado, energia coerente e energia interna do sistema e do ambiente, respectivamente.

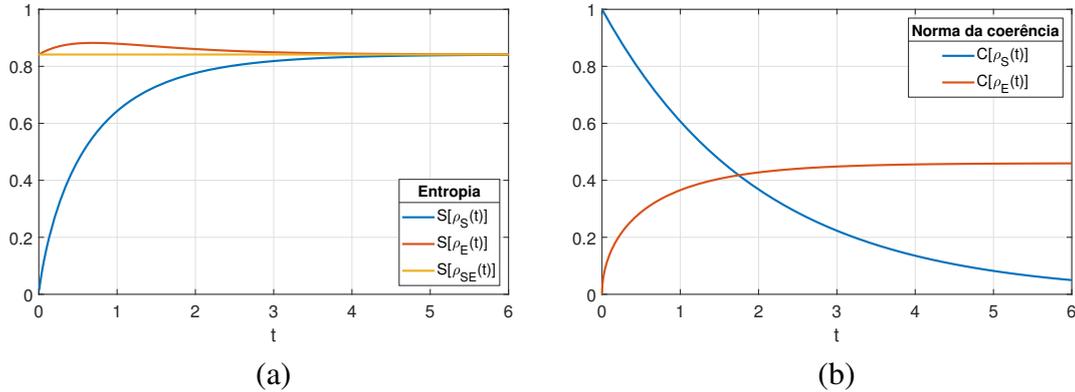
Figura 13: Evolução das propriedades termodinâmica do sistema e ambiente



A evolução temporal do calor trocado, energia interna e energia coerente do sistema  $S$  (a) e do ambiente  $E$  (b), interagindo através do canal de amortecimento de amplitude. Por simplicidade, assumimos  $\Gamma = 1$ .  
**Fonte:** Autoria própria

Notamos, a partir dos gráficos que  $\Delta U_S(t) = -\Delta U_E(t)$ , o que é esperado tendo em vista que  $S$  e  $E$  estão em um sistema composto  $SE$  fechado, e que a unitária  $\hat{U}$  é uma operação que conserva a energia total. Também é possível observar um fluxo de energia coerente, que sai do sistema para o ambiente, mostrando que o sistema está sofrendo decoerência. O calor, que está associado com a troca de energia acompanhada por variação de entropia, aumenta nos dois sistemas. Podemos perceber que, curiosamente, os subsistemas absorvem energia acompanhada de variação de entropia, que definimos como calor, o que do ponto de vista clássico causa estranheza, já que, como discutido anteriormente, toda energia térmica que o sistema ganha, o ambiente deve perder, porém isso apenas no regime de acoplamento fraco, onde podemos desprezar a energia de interação, no regime de acoplamento forte, que é o caso, devemos levar em consideração a contribuição da energia de interação.

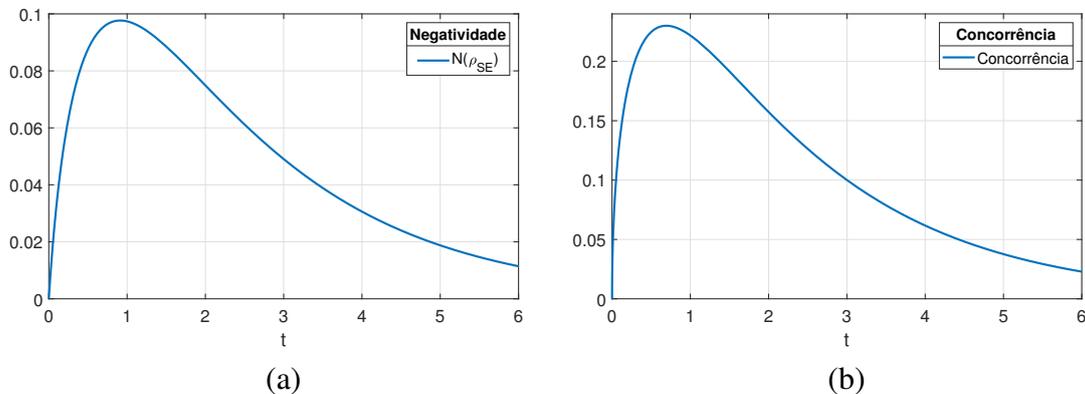
Figura 14: Evolução da entropia e norma da coerência



(a) Entropia do sistema, ambiente e do sistema composto. Note que, a entropia do sistema composto é constante, e a soma das entropias dos seus subsistemas respeita a propriedade de subaditividade. (b) Norma L1 de coerência para o sistema  $S$  e o ambiente  $E$ , sendo que os perfis das curvas estão de acordo com os resultados para a energia coerente. Para essa situação, assumimos  $\Gamma = 1$ . **Fonte:** Autoria própria

Vemos na Fig. (14.a) que a entropia aumenta para os dois sistemas, mas ainda assim respeita a propriedade de subaditividade, ou seja, a soma das entropias dos subsistemas é maior ou igual a entropia do sistema composto (NIELSEN; CHUANG, 2002). Também percebemos que a entropia do sistema composto é constante, já que a entropia é invariante por transformações unitárias, logo  $S[\rho_{SE}(t)] = S[\hat{U}\rho_{SE}(0)\hat{U}^\dagger] = S[\rho_{SE}(0)] = S[\rho_S(0) \otimes \rho_E(0)]$ . Além disso, a entropia para sistemas descorrelacionados é aditiva, então  $S[\rho_S(0) \otimes \rho_E(0)] = S[\rho_S(0)] + S[\rho_E(0)] = S[\rho_E(0)] \approx 0,84$ . Com relação à Fig. (14.b), foi utilizada a norma l1 de coerência, que é uma medida da coerência quântica de um estado denotado por  $\mathcal{C}_{l1} = \sum_{i \neq j} |\rho_{ij}|$ . Essa medida é calculada como a soma dos valores absolutos dos elementos fora da diagonal principal da matriz de densidade do sistema (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014).

Figura 15: Negatividade e concorrência em função do tempo



Percebemos a semelhança no perfil da negatividade (a) e da concorrência (b), onde o pico do emaranhamento ocorre em uma unidade de  $1/\Gamma$ , quando após isso ela só diminui com o tempo. **Fonte:** Autoria própria

Para quantificar as correlações quânticas, utilizamos dois métodos: a negatividade e a concorrência. Notamos na Fig. (15) que há uma semelhança entre os perfis da negatividade e concorrência. Percebemos que inicialmente o sistema e o ambiente estão descorrelacionados, quando logo de início a correlação quântica entre eles aumenta até atingir um pico no tempo de aproximadamente uma unidade de  $1/\Gamma$ . Após isso, a correlação diminui assintoticamente.

## Capítulo IV

### Conclusão

O foco deste trabalho foi realizar uma análise das propriedades termodinâmicas, como calor, trabalho, energia interna e energia coerente, de um sistema de dois níveis acoplado com um ambiente térmico, com ênfase no comportamento da energia coerente advinda de uma definição mais geral da primeira lei da termodinâmica quântica. Apesar de sistemas quânticos fechados nos proporcionar diversos resultados, encontramos comumente na natureza sistemas quânticos abertos, cujo estudo nos auxilia na compreensão de como o comportamento macroscópico emerge a partir de uma fundamentação quântica da natureza, além de nos esclarecer como mitigar os efeitos da decoerência, que vem a ser o maior obstáculo na construção de tecnologias quânticas.

No capítulo I, apresentamos os conceitos básicos da mecânica quântica necessários para o desenvolvimento e compreensão do trabalho, como os sistemas de dois níveis, sistemas abertos e o formalismo de matriz densidade, além de operações quânticas, entropia e informação. No capítulo II, discutimos a primeira lei da termodinâmica, tanto no âmbito clássico quanto no quântico, destacando como a energia coerente se manifesta a partir da primeira lei e como a coerência está relacionada a isso. No capítulo III, apresentamos o sistema utilizado no estudo e como ele interage com o ambiente. Especificamente, analisamos os processos energéticos que ocorrem quando o sistema está acoplado a um ambiente térmico. A evolução do sistema composto é descrita por uma transformação unitária e as propriedades termodinâmicas foram estudadas a partir de uma definição mais geral da primeira lei da termodinâmica quântica.

Por fim, através de toda fundamentação teórica apresentada e do estudo realizado, apresentamos novas investigações sobre o conceito de energia coerente, recentemente proposto, e confirmamos que é de fato um tipo de energia que é trocada com o meio externo apenas quando a coerência quântica entre os seus autoestados de energia varia. A apresentação da primeira lei da termodinâmica quântica nesse formato se mostra mais inteligível principalmente quando tratamos de uma dinâmica em que o operador densidade do sistema em algum momento não comuta com o seu hamiltoniano.

## Referências

- ALICKI, R. The quantum open system as a model of the heat engine. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 12, n. 5, p. L103, 1979. Citado na página 47.
- BAUMGRATZ, T.; CRAMER, M.; PLENIO, M. B. Quantifying coherence. *Physical Review Letters*, APS, v. 113, n. 14, p. 140401, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 46 e 55.
- BELL, J. S. On the Einstein Podolsky Rosen paradox. *Physics Physique Fizika*, APS, v. 1, n. 3, p. 195, 1964. Citado na página 15.
- BENENTI, G.; CASATI, G.; STRINI, G. *Principles of Quantum Computation and Information-Volume II: Basic Tools and Special Topics*. [S.l.]: World Scientific Publishing Company, 2007. Citado na página 30.
- BENNETT, C. H. et al. Concentrating partial entanglement by local operations. *Physical Review A*, APS, v. 53, n. 4, p. 2046, 1996. Citado na página 15.
- BERNARDO, B. de L. Unraveling the role of coherence in the first law of quantum thermodynamics. *Physical Review E*, APS, v. 102, n. 6, p. 062152, 2020. Citado 5 vezes nas páginas 7, 41, 44, 46 e 47.
- BERNARDO, B. de L. Relating heat and entanglement in strong-coupling thermodynamics. *Physical Review E*, APS, v. 104, n. 4, p. 044111, 2021. Citado 3 vezes nas páginas 7, 45 e 49.
- CALABRESE, P.; CARDY, J.; TONNI, E. Entanglement negativity in quantum field theory. *Physical Review Letters*, APS, v. 109, n. 13, p. 130502, 2012. Citado na página 15.
- CARNOT, S. *Reflections on the Motive Power of Fire and on Machines Fitted to Develop That Power*. [S.l.]: The John Hopkins University Press, 1860. Citado na página 37.
- CLAUSIUS, R. Über die bewegende kraft der wärme und die gesetze, welche sich daraus für die wärmelehre selbst ableiten lassen. *Annalen der Physik*, Wiley Online Library, v. 141, n. 3, p. 353–380, 1850. Citado na página 40.
- DEFFNER, S.; CAMPBELL, S. *Quantum Thermodynamics: An introduction to the thermodynamics of quantum information*. [S.l.]: Morgan & Claypool Publishers, 2019. Citado 4 vezes nas páginas 6, 37, 38 e 39.
- GIROLAMI, D.; TUFARELLI, T.; ADESSO, G. Characterizing nonclassical correlations via local quantum uncertainty. *Physical Review Letters*, APS, v. 110, n. 24, p. 240402, 2013. Citado na página 46.
- GISIN, N. et al. Quantum cryptography. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 74, n. 1, p. 145, 2002. Citado na página 6.
- HEISENBERG, W. Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik. v. 43, n. 3-4, p. 172–198, mar. 1927. ISSN 1434-6001, 1434-601X. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/BF01397280>>. Citado na página 6.
- HELMHOLTZ, H. v. On the conservation of force. *Annalen der Physik und Chemie*, Wiley, v. 128, p. 69–80, 1847. Citado na página 38.

---

JAFFE, R. L. *Supplementary Notes on Dirac Notation, Quantum States, Etc.* MIT OpenCourseWare, 1996. Disponível em: <<https://web.mit.edu/8.05/handouts/jaffe1.pdf>>. Citado na página 8.

JARZYNSKI, C. Stochastic and macroscopic thermodynamics of strongly coupled systems. *Physical Review X*, APS, v. 7, n. 1, p. 011008, 2017. Citado na página 48.

JOULE, J. P. On the mechanical equivalent of heat. *Royal Society of London, Philosophical Transactions*, v. 135, p. 61–82, 1850. Citado 3 vezes nas páginas 6, 37 e 39.

KELVIN, W. T. On the dynamical theory of heat, with numerical results deduced from Mr. Joule's equivalent of a thermal unit, and M. Regnault's observations on steam. *Earth and Environmental Science Transactions of The Royal Society of Edinburgh*, Royal Society of Edinburgh Scotland Foundation, v. 20, n. 2, p. 261–288, 1853. Citado na página 39.

KITTEL, C.; KROEMER, H. *Thermal physics*. [S.l.]: Freeman, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 39 e 42.

KRAUS, K. States, effects, and operations: fundamental notions of quantum theory. *Lecture notes in physics*, Springer, v. 190, p. 1–8, 1983. Citado na página 20.

NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. *Quantum computation and quantum information*. [S.l.]: American Association of Physics Teachers, 2002. Citado 10 vezes nas páginas 6, 14, 19, 20, 22, 26, 33, 35, 36 e 55.

PERES, A. Separability criterion for density matrices. *Physical Review Letters*, APS, v. 77, n. 8, p. 1413, 1996. Citado na página 16.

PETZ, D. *Quantum information theory and quantum statistics*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2007. Citado na página 30.

PLANCK, M. Zur theorie des gesetzes der energieverteilung im normalspektrum. *Berlin*, p. 237–245, 1900. Citado na página 6.

PLENIO, M. B.; VITELLI, V. The physics of forgetting: Landauer's erasure principle and information theory. *Contemporary Physics*, Taylor & Francis, v. 42, n. 1, p. 25–60, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 31.

PRESKILL, J. Lecture notes for physics 229: Quantum information and computation. *California Institute of Technology*, v. 16, n. 1, p. 1–8, 1998. Citado na página 14.

QUAN, H.-T. et al. Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines. *Physical Review E*, APS, v. 76, n. 3, p. 031105, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 41 e 42.

RIBEIRO, W. L.; LANDI, G. T.; SEMIÃO, F. L. Quantum thermodynamics and work fluctuations with applications to magnetic resonance. *American Journal of Physics*, American Association of Physics Teachers, v. 84, n. 12, p. 948–957, 2016. Citado na página 42.

SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. *Mecânica quântica moderna*. [S.l.]: bookman, 2013. Citado na página 9.

SCHLOSSHAUER, M. A. *Decoherence: and the quantum-to-classical transition*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2007. Citado na página 13.

- 
- SHANNON, C. E. A mathematical theory of communication. *Bell System Technical Journal*, Wiley Online Library, v. 27, n. 3, p. 379–423, 623–656, 1948. Citado na página 30.
- STRELTSOV, A.; ADESSO, G.; PLENIO, M. B. Colloquium: Quantum coherence as a resource. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 89, n. 4, p. 041003, 2017. Citado na página 6.
- VEDRAL, V. The role of relative entropy in quantum information theory. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 74, n. 1, p. 197, 2002. Citado na página 6.
- VIDAL, G.; WERNER, R. F. Computable measure of entanglement. *Physical Review A*, APS, v. 65, n. 3, p. 032314, 2002. Citado na página 15.
- WERNER, R. F.; WOLF, M. M. All-multipartite Bell-correlation inequalities for two dichotomic observables per site. *Physical Review A*, APS, v. 64, n. 3, p. 032112, 2001. Citado na página 15.
- WILDE, M. M. *Quantum information theory*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2013. Citado na página 6.
- WOOTTERS, W. K. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. *Physical Review Letters*, APS, v. 80, n. 10, p. 2245, 1998. Citado na página 16.
- WOOTTERS, W. K. Entanglement of formation and concurrence. *Quantum Inf. Comput.*, v. 1, n. 1, p. 27–44, 2001. Citado na página 16.
- ZUREK, W. H. Pointer basis of quantum apparatus: Into what mixture does the wave packet collapse? *Physical Review D*, APS, v. 24, n. 6, p. 1516, 1981. Citado na página 6.
- ZYCZKOWSKI, K. et al. On the volume of the set of mixed entangled states. *arXiv preprint quant-ph/9804024*, 1998. Citado na página 15.