

Universidade de São Paulo
Projeto de mestrado

Irreversibilidade e produção de entropia em sistemas quânticos Gaussianos

William Tiago Batista Malouf
Orientador: Gabriel Teixeira Landi

Resumo

O conceito de irreversibilidade está entre os mais importantes da termodinâmica. Apesar de conceitos como este terem sido inicialmente concebidos para descrever sistemas macroscópicos, um grande esforço vem sendo feito nos últimos anos para estendê-los para sistemas micro e mesoscópicos. Apesar desses avanços, ainda há diversas questões em aberto. O problema central a ser abordado neste projeto diz respeito à medidas de irreversibilidade em sistemas quânticos, para os quais não há atualmente um formalismo unificado. Quantificar a irreversibilidade de um processo quântico configura um problema relevante para diversas aplicações, em particular para a computação quântica, uma vez que tais medidas estão relacionadas com a eficiência de um processo. Propomos abordar este problema focando no caso específico de estados quânticos Gaussianos. Tais estados surgiram como uma alternativa nos últimos anos para a computação quântica, pois possuem uma série de propriedades especiais, além de serem de mais fácil manipulação analítica. A proposta deste projeto, que configura uma continuação da linha de pesquisa já em desenvolvimento no grupo do Prof. Gabriel T. Landi, será dividida em duas etapas. A primeira consiste em caracterizar a irreversibilidade de mapas Gaussianos gerais, Markovianos ou não. Já na segunda etapa buscaremos relacionar estas medidas com conceitos de informação quântica, como emaranhamento, discórdia, perda de coerência e perda de informação.

1 Introdução

A termodinâmica é uma das teorias mais bem sucedidas de toda a física, com aplicações nas mais diversas áreas do conhecimento. Entre seus trunfos, talvez o maior seja sua capacidade de caracterizar processos físicos, seja por meio de grandezas como trabalho e calor, seja através de medidas que refletem a irreversibilidade e a eficiência de um processo. Apesar de ter sido inicialmente desenvolvida para sistemas macroscópicos, tais conceitos encontram amplo respaldo em diversas outras situações de interesse da pesquisa atual. Por exemplo, motores celulares são, em grande medida, análogos à máquinas térmicas, convertendo energia (neste caso de natureza química) em trabalho útil usado para a realização de tarefas [?, ?]. Torna-se natural, portanto, estender os conceitos de termodinâmica também para sistemas microscópicos, com o objetivo de responder perguntas como, por exemplo, qual a eficiência de um motor celular. Tal extensão requer que levemos em conta novos ingredientes, como os efeitos estocásticos (flutuações térmicas) inerentes à sistemas microscópicos. Esta área, atualmente conhecida como termodinâmica estocástica, vem evoluindo rapidamente nos últimos anos.

O próximo passo natural deste programa é a generalização da termodinâmica para sistemas quânticos. Neste caso, além dos efeitos estocásticos, devemos levar em conta também efeitos genuinamente quânticos, como o colapso da função de onda em uma medida ou propriedades como emaranhamento e discórdia [?, ?]. O papel da medida influencia, por exemplo, a forma como caracterizamos o trabalho realizado em um processo [?], ou o calor trocado entre dois sistemas [?]. Já o emaranhamento pode ser interpretado como um recurso disponível para a operação de uma máquina térmica [?, ?, ?, ?, ?, ?]. Estas idéias são também motivadas pelos avanços recente na manipulação experimental de sistemas quânticos, que está permitindo pela primeira vez acessar tais propriedades [?, ?, ?]. Esta linha de pesquisa vem sendo denominada de termodinâmica quântica e corresponde, atualmente, à principal área de atuação do Prof. Gabriel T. Landi [?, ?, ?, ?, ?, ?, ?, ?, ?, ?].

A termodinâmica quântica encontra-se na fronteira entre a mecânica estatística e a informação quântica. Em particular, entender processos quânticos sobre a ótica da termodinâmica poderá ter um papel importante em tarefas de computação quântica. O motivo está na similaridade entre operações lógicas e máquinas térmicas: em ambos os casos, um estado de entrada é transformado, mediante um certo número de recursos disponíveis, em um estado de saída [?, ?, ?, ?, ?]. Caracterizar, portanto, a irreversibilidade ou a eficiência de tal processo, auxiliará na construção de novos algoritmos quânticos.

Neste projeto o foco será no conceito de irreversibilidade, que pode ser caracterizada monitorando as mudanças na entropia de um sistema. A evolução da entropia de um sistema é fundamentalmente diferente de outras grandezas mais convencionais, como a energia por exemplo. Durante a realização de um processo, a energia do sistema só pode mudar se houver a troca de energia com um ambiente ou agente externo. A entropia, por outro lado, não satisfaz esse tipo de lei de conservação. Além do fluxo de entropia que pode ser trocado entre o sistema e o ambiente, é possível também que uma certa entropia seja produzida dentro do sistema. Essa grandeza, denominada de *produção de entropia* constitui a chave para caracterizar a irreversibilidade de um processo [?, ?, ?, ?, ?, ?, ?, ?]. Da segunda lei da termodinâmica, sabe-se que a produção de entropia nunca pode

ser negativa, sendo nula somente para um processo reversível. Matematicamente, escrevemos a taxa de variação da entropia S de um sistema como

$$\frac{dS}{dt} = \Pi - \Phi \quad (1)$$

onde Π é a taxa de produção de entropia e Φ é a taxa de fluxo de entropia, do sistema para o ambiente. Segue então da segunda lei que $\Pi \geq 0$ com $\Pi = 0$ se e só se o processo for reversível.

A produção e o fluxo de entropia não são observáveis do sistema e, portanto, não podem ser medidos diretamente em um experimento. Consequentemente, torna-se necessário um formalismo teórico que relacione tais grandezas com observáveis acessíveis experimentalmente. Ao contrário de sistemas clássicos, onde tal formalismo já é bem estabelecido [?, ?, ?, ?, ?], não há atualmente uma formulação quântica satisfatória para este problema, apesar de avanços recentes [?, ?, ?, ?, ?, ?, ?, ?, ?].

No último ano o Prof. Gabriel T. Landi vem trabalhando neste problema, em colaboração com o Prof. Mauro Paternostro da Queen's University em Belfast, Reino Unido e com o Dr. Jader Pereira dos Santos, pós-doutorando no grupo [?, ?]. O intuito deste projeto é considerar o caso específico de estados quânticos Gaussianos [?, ?, ?, ?, ?, ?, ?]. Estes estados vem recebendo considerável atenção na literatura devido às diversas propriedades especiais que possuem e por aparecerem como uma alternativa aos *qubits* para a computação quântica [?]. Nas referências [?, ?] o grupo do Prof. Gabriel T. Landi mostrou que para estados coerentes é possível construir uma formulação consistente para o fluxo e a produção de entropia em termos de correntes de probabilidade no espaço de fase.

O objetivo deste projeto é continuar esta linha de pesquisa. A primeira parte consistirá em construir a teoria da produção de entropia para sistemas Gaussianos sujeitos a mapas dinâmicos gerais, Markovianos e não-Markovianos [?, ?]. Já na segunda parte buscaremos relacionar nossas medidas de irreversibilidade com grandezas de interesse da informação quântica, como emaranhamento, discórdia [?, ?], perdas de coerência e perdas de informação. Este trabalho contará com a colaboração do Prof. Mauro Paternostro e do Prof. Gerardo Adesso, da Universidade de Nottingham, especialista em estados quânticos Gaussianos [?, ?, ?, ?, ?]. Acreditamos que fomentar a colaboração internacional com especialistas na área seja de grande valia para a formação do aluno.

Passamos agora a descrever o projeto em mais detalhes. Nas Sec. 2 descreveremos os fundamentos teóricos deste projeto e na Sec. 3 listaremos de forma explícita e discutiremos em detalhes os objetivos do projeto e o cronograma de atividades.

2 Fundamentação teórica

2.1 Caracterização de um estado Gaussiano

Considere um sistema descrito por operadores bosônicos a_i e a_i^\dagger , com $i = 1, \dots, N$. Tais sistemas podem ser caracterizados no espaço de fase de estados coerentes através de diversas medidas de quasi-probabilidade. Entre elas, a mais

usual é a função de Wigner definida como

$$W = \int D\boldsymbol{\lambda} e^{-\sum_i (\lambda_i \alpha_i^* - \lambda_i^* \alpha_i)} \text{tr} \left\{ \rho e^{\sum_i (\lambda_i a_i^\dagger - \lambda_i^* a_i)} \right\} \quad (2)$$

onde $D\boldsymbol{\lambda} = d^2\lambda_1 \dots d^2\lambda_N$, com a integral em cada variável λ_i sendo sobre todo o plano complexo. O estado de um sistema desse tipo é dito *Gaussiano* se a função de Wigner, ou qualquer outra medida de quasi-probabilidade, é uma função Gaussiana nas variáveis $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_N, \alpha_1^*, \dots, \alpha_N^*)$.

Tal estado Gaussiano geral é completamente caracterizado pela sua média e matriz de covariância. Para defini-las, considere o vetor de operadores $\mathbf{u} = (a_1, \dots, a_N, a_1^\dagger, \dots, a_N^\dagger)$, de tamanho $2N$. A média é então definida como o vetor $\boldsymbol{\mu} = \langle \mathbf{u} \rangle$, ao passo que o elemento (i, j) da matriz de covariância é definido como

$$\Theta_{i,j} = \frac{1}{2} \langle \{u_i, u_j^\dagger\} \rangle - \langle u_i \rangle \langle u_j^\dagger \rangle \quad (3)$$

Com essas definições, a função de Wigner Gaussiana mais geral pode ser escrita como

$$W = \frac{1}{\pi^N |\Theta|^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\mu})^\dagger \Theta^{-1} (\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\mu}) \right\} \quad (4)$$

Por exemplo, se consideramos um único modo bosônico com $H = \omega a^\dagger a$, o estado térmico será um estado Gaussiano com

$$W_{\text{eq}} = \frac{1}{\pi(\bar{n} + 1/2)} \exp \left\{ -\frac{|\alpha|^2}{\bar{n} + 1/2} \right\} \quad (5)$$

onde $\bar{n} = (e^{\beta\omega} - 1)^{-1}$ é a distribuição de Bose-Einstein.

Para estados Gaussianos a função de Wigner é sempre positiva e podemos, portanto, definir como medida de entropia a grandeza

$$S = - \int D\boldsymbol{\alpha} W \ln W \quad (6)$$

que denominaremos de entropia de Wigner. Na Ref. [?] foi demonstrado que esta grandeza coincide, a menos de uma constante, com a entropia de Rényi-2. Além disso, foi mostrado que para estados Gaussianos, ela satisfaz a “strong subadditivity inequality”, propriedade fundamental que garante que a informação mútua entre dois sistemas é sempre não-negativa. Estes resultados mostram, portanto, que a entropia (6) fornece uma medida fidedigna da desordem de um sistema Gaussiano.

A principal vantagem de formular medidas entrópicas usando a função de Wigner é que ela permite realizar todos os cálculos de maneira analítica. Por exemplo, para um estado Gaussiano geral (4), a entropia pode ser escrita como

$$S = \frac{1}{2} \ln |\Theta| \quad (7)$$

Da mesma forma, se dividimos o sistema em duas partes, a informação mútua, que mede a correlação entre os sub-sistemas, pode ser escrita como

$$\mathcal{I}(A, B) = S(W_A) + S(W_B) - S(W_{AB}) = \frac{1}{2} \ln \left\{ \frac{|\Theta_A| |\Theta_B|}{|\Theta_{AB}|} \right\} \quad (8)$$

Dessa expressão segue que, se o estado inicial é um estado Gaussiano puro, então o emaranhamento entre os dois sub-sistemas será dado por

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \ln |\Theta_A| = \frac{1}{2} \ln |\Theta_B| \quad (9)$$

É possível também definir medidas de emaranhamento de formação, correlações clássicas e discórdia quântica [?].

2.2 Dinâmica de sistemas quânticos abertos

O objetivo central de nossa abordagem é separar a entropia de Wigner (6) na forma (1), a fim de identificar os termos que correspondem ao fluxo (Φ) e à produção (Π) de entropia. Para isso, estamos interessados na dinâmica de sistemas quânticos Gaussianos em contato com o ambiente. Tais sistemas podem ser modelados pela equação mestra de Lindblad para a evolução da matriz densidade ρ do sistema:

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H, \rho] + D(\rho) \quad (10)$$

onde H é o Hamiltoniano do sistema e $D(\rho)$ é o dissipador de Lindblad. Por exemplo, se o nosso sistema consiste de um único modo bosônico, com Hamiltoniano $H = \omega a^\dagger a$, um dissipador muito estudado na literatura é

$$D(\rho) = \gamma(\bar{n} + 1) \left[a\rho a^\dagger - \frac{1}{2}\{a^\dagger a, \rho\} \right] + \gamma\bar{n} \left[a^\dagger \rho a - \frac{1}{2}\{aa^\dagger, \rho\} \right] \quad (11)$$

onde γ é a constante de acoplamento com o banho e $\bar{n} = (e^{\beta\omega} - 1)^{-1}$ é a distribuição de Bose-Einstein.

A equação de Lindblad (10) pode ser transformada em uma equação diferencial parcial para a função de Wigner $W(\alpha, \alpha^*)$, usualmente denominada de equação de Fokker-Planck quântica, em referência à equação análoga que aparece em processos estocástico clássicos. Para o dissipador (11) esta equação lê-se [?]

$$\partial_t W = -i\omega \left[\partial_{\alpha^*}(\alpha^* W) - \partial_\alpha(\alpha W) \right] + \mathcal{D}(W), \quad (12)$$

onde o primeiro termo corresponde à parte unitária e o segundo descreve o efeito do dissipador. Este último pode ser escrito como

$$\mathcal{D}(W) = \partial_\alpha J(W) + \partial_{\alpha^*} J^*(W), \quad (13)$$

onde

$$J(W) = \frac{\gamma}{2} \left[\alpha W + (\bar{n} + 1/2) \partial_{\alpha^*} W \right]. \quad (14)$$

Esta grandeza adquire uma interpretação física clara se notarmos que a Eq. (12) corresponde à uma equação de continuidade para a função de Wigner. Dessa forma, $J(W)$ pode ser interpretada como a componente irreversível da corrente de probabilidade no plano complexo. Tal interpretação é corroborada pelo fato de que a corrente $J(W)$ se anula *somente* quando $W = W_{\text{eq}}$, Eq. (5). Isso significa que, nessa formulação, o estado de equilíbrio termodinâmico pode ser interpretado como o único estado para o qual a corrente se anula.

Na Ref. [?] propomos, em analogia com resultados já existentes na literatura, que a produção e o fluxo de entropia podem ser definidos como

$$\Pi = - \int d^2\alpha D(W) \ln(W/W_{\text{eq}}) \quad (15)$$

$$\Phi = - \int d^2\alpha D(W) \ln W_{\text{eq}} \quad (16)$$

A produção de entropia, após algumas manipulações, se torna

$$\Pi = \frac{4/\gamma}{\bar{n} + 1/2} \int d^2\alpha \frac{|J(W)|^2}{W} \quad (17)$$

que é claramente não negativa e nula somente quando $W = W_{\text{eq}}$, como esperado da segunda lei da termodinâmica.

Já para o fluxo de entropia, obtemos

$$\Phi = \frac{\gamma}{\bar{n} + 1/2} \left[\langle a^\dagger a \rangle - \bar{n} \right] = \frac{\Phi_E}{\omega(\bar{n} + 1/2)} \quad (18)$$

onde Φ_E é o fluxo de energia entre o sistema e o banho. No limite de altas temperaturas obtemos $\omega(\bar{n} + 1/2) \simeq T$, o que nos leva a

$$\Phi \simeq \frac{\Phi_E}{T}$$

um resultado muito conhecido da termodinâmica de equilíbrio. Portanto, nosso formalismo recupera resultados tradicionais no limite de altas temperaturas, com novos efeitos no limite $T \rightarrow 0$.

A dinâmica de Lindblad que acabamos de discutir é somente um exemplo da dinâmica geral de um sistema Gaussiano. Na realidade, é possível demonstrar que o mapa dinâmico mais geral de um sistema Gaussiano pode ser descrito simplesmente pela sua ação na média e na covariância do sistema como [?]

$$\boldsymbol{\mu} \rightarrow X\boldsymbol{\mu}, \quad \Theta \rightarrow X\Theta X^\dagger + Y \quad (19)$$

onde X e Y são matrizes de tamanho $2N \times 2N$. É possível obter critérios também estabelecendo a positividade (ou completa positividade) e a Markovianidade de um mapa como esse [?]. Este último, em particular, foi desenvolvido muito recentemente.

3 Objetivos do projeto

Este projeto tem dois objetivos centrais:

1. Estabelecer um formalismo para quantificar a produção e o fluxo de entropia de um mapa Gaussiano geral, Markoviano ou não-Markoviano;
2. Relacionar as taxa de produção e fluxo de entropia com grandezas de interesse da informação quântica, como emaranhamento, discórdia, perda de coerência e perda de informação.

Para realizar estes objetivos, o estudante deverá concluir as seguintes etapas:

(a) Familiarização com os conceitos de estados quânticos Gaussianos

A literatura em estados quânticos Gaussianos, em particular no que diz respeito à mapas Gaussianos e a medidas de informação, é bastante recente [?, ?, ?, ?, ?, ?]. Portanto, a primeira etapa do projeto será ambientar o estudante com estes resultados e selecionar aqueles que serão de fato utilizados na pesquisa.

(b) Familiarização com a formulação de irreversibilidade desenvolvida para equações de Lindblad

Em paralelo com o item anterior, o aluno deverá ganhar familiaridade com os conceitos desenvolvidos na Ref. [?], onde a produção e o fluxo de entropia foram formuladas para equações de Lindblad. Isso inclui também aplicar este formalismo a alguns problemas simples.

(c) Desenvolvimento do formalismo de irreversibilidade para mapas Gaussianos

Uma vez familiarizado com os conceitos básicos, o aluno poderá buscar o objetivo principal deste trabalho, que é definir a produção e o fluxo de entropia para um sistema sujeito a um mapa Gaussiano geral. O foco, por motivações físicas, será em mapas completamente positivos. Os efeitos da Markovianidade (ou falta de) deverão ser considerados também.

(d) Relação com medidas de informação

Uma vez desenvolvido o formalismo principal, o próximo passo será relacionar os resultados com medidas de informação como emaranhamento, discórdia, perda de coerência e perda de informação. O objetivo do trabalho não é desenvolver um formalismo teórico para estas grandezas que são, em grande medida, já bem estabelecidas na literatura [?, ?, ?, ?, ?, ?]. O objetivo é interpretar estas grandezas sob a ótica da termodinâmica quântica e relacioná-las com a separação (1) entre produção e fluxo de entropia.

(e) Aplicação dos resultados para modelos simples

A última etapa será aplicar os resultados aqui obtidos para modelos simples. Quais modelos iremos focar especificamente ainda é uma questão em aberto e dependerá dos resultados que o estudante irá obter. Entre as possibilidades mencionamos a área de cavidades opto-mecânicas e átomos ultra-frios em redes óticas, duas áreas que já foram consideradas pelo nosso grupo em [?] e com as quais podemos estabelecer colaborações com grupos experimentais.

Abaixo listamos o cronograma para o desenvolvimento das atividades (a)-(e) descritas acima, divididas semestralmente.

- 2017-1: disciplinas da pós graduação; tópicos (a) e (b).
- 2017-2: disciplinas da pós graduação; término dos tópicos (a) e (b); início do tópico (c)
- 2018-1: tópicos (c) e (d).
- 2018-2: término do tópico (d); tópico (e) e escrita da dissertação.

4 Conclusões e perspectivas

Este projeto versa sobre um assunto de relevância para a pesquisa atual em física quântica, o que pode ser evidenciado pela número considerável de publicações recentes na área em revistas de alto impacto. O objetivo, ao propor este projeto, foi buscar um balanço entre a especialização num tópico de pesquisa específico e a formação geral do estudante. Ao nosso entender, as técnicas e os conceitos que serão utilizadas neste projeto também possuem aplicações em outras áreas da física, como física da matéria condensada, ótica quântica e informação quântica. A colaboração ativa com pesquisadores estrangeiros, especialistas nestas áreas do conhecimento, será também de grande valia para a formação do estudante. Finalmente, os objetivos propostos, se realizados de forma apropriada, podem resultar em um ou dois trabalhos científicos em revistas de prestígio na área, número este que consideramos razoável para um projeto de mestrado.

Referências