
Reconstrução da Matriz Densidade via Corrente Spin Polarizada

Midana Baial Sambú



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Uberlândia
2022

Midana Baial Sambú

Reconstrução da Matriz Densidade via Corrente Spin Polarizada

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação de Instituto de Física da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Área de concentração: Informação Quântica

Orientador: Fabrício Macedo de Souza

Uberlândia

2022

Ficha Catalográfica Online do Sistema de Bibliotecas da UFU
com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

S187 2023	<p>Sambú, Midana Baial, 1996- Reconstrução da Matriz Densidade via corente spin polarizada [recurso eletrônico] / Midana Baial Sambú. - 2023.</p> <p>Orientador: Fabrício Macedo de Souza. Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Uberlândia, Pós-graduação em Física. Modo de acesso: Internet. Disponível em: http://doi.org/10.14393/ufu.di.2023.152 Inclui bibliografia. Inclui ilustrações.</p> <p>1. Física. I. Souza, Fabrício Macedo de, 1975-, (Orient.). II. Universidade Federal de Uberlândia. Pós-graduação em Física. III. Título.</p> <p style="text-align: right;">CDU: 53</p>
--------------	--

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de acordo com o AACR2:
Gizele Cristine Nunes do Couto - CRB6/2091
Nelson Marcos Ferreira - CRB6/3074

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

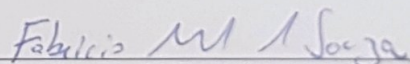
MIDANA BAIAL SAMBÚ

RECONSTRUÇÃO DA MATRIZ DENSIDADE VIA CORRENTE SPIN
POLARIZADA

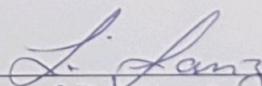
Dissertação apresentada ao programa de Pós-Graduação em Física, do Instituto de Física, da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito parcial para obtenção de título de Mestre em Física.

Aprovada em: 03 de Março de 2023

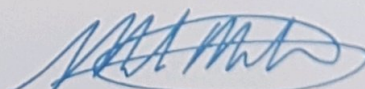
BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Fabricio Macedo de Souza
Instituição de Ensino Superior : UFU



Prof. Dr. Liliana Sanz De La Torre
Instituição de Ensino Superior : UFU



Prof. Dr. Marcelo Martinelli
Instituição de Ensino Superior: USP

*Este trabalho é dedicado aos meus familiares, em especial, ao meu Pai, à minha mãe,
aos meus irmãos e às minhas irmãs,
nós vencemos de novo.*

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais, Fernando Baial Sambú e Isabel Da Silva Branco, por todos ensinamentos, todo carinho, toda proteção e educação; aos meus irmãos e a todos meus familiares. Agradeço a Universidade Federal de Uberlândia (UFU) pela oportunidade de estudar e obter o título de mestrado, em especial aos professores e à coordenação do curso de Programa de Pós-Graduação em Física. Por fim, agradeço a todos que me ajudaram a crescer, direta ou indiretamente, tanto a nível acadêmico quanto pessoal, em especial ao meu professor e orientador Fabrício Macedo de Souza.

“The best possible knowledge of a whole does not necessarily include the best possible knowledge of all its parts.”
(Erwin R. J. A. Schrödinger)

Resumo

A presente dissertação surgiu como proposta teórica para a reconstrução da matriz densidade de um único *qubit* de *spin* do elétron usando o transporte de *spin* polarizado. O modelo consiste em um sistema composto por ponto quântico acoplado ao reservatório ferromagnéticos com campo magnético ao longo de plano xy na esfera de Bloch. O intuito é de investigar os eventos de tunelamento de *spin* polarizado ao longo de direção $x\pm$, $y\pm$ e $z\pm$ que fornecem as distribuições de probabilidades ao longo desses eixos de quantização, no qual relacionamos, através dos parâmetros de Stokes, com a matriz densidade, permitindo, assim, a reconstrução da matriz densidade. Para essa finalidade, fizemos a simulação experimental utilizando o *python* no qual criamos códigos que nos permitiram realizar a simulação do sistema. Sendo um sistema aberto, utilizamos a equação mestra de Lindblad para simular a dinâmica do sistema que nos fornece a evolução do sistema ao longo do tempo. Após a simulação experimental, fomos capaz de reconstruir a matriz densidade a partir das probabilidades obtidas através da dinâmica do sistema, confirmando, assim, o resultado previsto pelo nosso modelo teórico. O modelo oferece uma visão sobre a matriz densidade de sistema quântico aberto, amplitude de probabilidade e fases relativas.

Palavras-chave: Matriz Densidade. Tomografia. Transporte Quântico. Informação Quântica. Sistema Aberto. Decoerência Quântica..

Abstract

This present thesis araised as theoretical proposal for the reconstruction of density matrix of a single electron spin qubit using spin polarized transport. This model consists in a composed system for quantum dot attached to the ferromagnetics reservoir with magnetic field along xy plane on the Bloch sphere. The aim is investigating tunneling events of polarized spin along $x\pm$, $y\pm$ and $z\pm$ direction that provide distribution of probabilities along these axis-quantization, in which we relate, through Stokes parameters, with density matrix, allowing, thereby, the reconstruction of the density matrix. For this aim, we did experimental simulation using python in which we created code that allowed us making the simulation of the system. Being an open system, we used the Lindblad master equation to simulate the dynamics of the system that provide us the evolution of the system along time. After experimental simulation, we were able of reconstructing the density matrix from probabilities getting through of dynamics of the system, verifying, thereby, the predict results by our theoretical model. The model offers a vision about density matrix of open quantum system, probability amplitudes and relative phases.

Keywords: Density Matrix. Tomography. Quantum Transport. Quantum Information. Open System. Quantum Decoherence..

Lista de ilustrações

Figura 1 – Pontos Quânticos de InAs acoplados a reservatórios ferromagnético de Cobalto (Co) (HAMAYA et al., 2007).	20
Figura 2 – Junção semiconductor - ponto quântico - semiconductor obtida pela criação de um contato entre nanocristal SiGe e eletrodos de alumínio (KATSAROS et al., 2010).	20
Figura 3 – Estado $ \psi\rangle$ de um <i>qubit</i> representado no ponto da esfera de Bloch (BARCELOS; ANDRADE; BOAVENTURA,)	29
Figura 4 – Relação entre pontos de entrada x e a saída y .(GEEKSFORGEES, 2022)	37
Figura 5 – Gráfico de regressão linear que mostra os pontos de resposta atual (círculos verdes), os pontos de resposta prevista (quadrados vermelhos) e o erro residual (linhas tracejadas). (STOJILJKOVIC, 2021)	38
Figura 6 – Implementação de regressão linear e regressão polinomial na relação entre pontos de entrada (temperatura) e pontos de saída (pressão). (GEEKSFORGEES, 2022)	39
Figura 7 – Implementação de regressão polinomial de grau 1, 2, 3 e 5 (STOJILJKOVIC, 2021).	40
Figura 8 – Sistema Quântico aberto composto por ponto quântico e reservatório ferromagnético com campo magnético na direção x . Γ_0 , parâmetro de relaxamento; $ z+\rangle$, <i>spin</i> para cima na direção $z+$; λ , eixo de orientação de magnetização; σ , spin do elétron; \vec{B} , campo magnético.	44
Figura 9 – Contagem de eventos de tunelamento em função de tempo (probabilidade) para orientação de <i>spin</i> ao longo de direção x , y e z	63
Figura 10 – Matriz densidade determinada a partir das probabilidades da Fig. 9 ao longo de direção $x\pm$, $y\pm$ e $z\pm$	64
Figura 11 – Elementos de matriz densidade reconstruída. Análise comparativa entre o sistema fechado ($\Gamma_0 = 0$) e sistema aberto ($\Gamma_0 \neq 0$).	65

Figura 12 – Dinâmica de estados detectados na Esfera de Bloch com $\theta_B = 0$. A seta verde indica direção do campo magnético e a seta laranja indica o estado inicial do sistema. 66

Sumário

1	INTRODUÇÃO	17
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	23
2.1	Operador Densidade	23
2.1.1	Operador densidade reduzido	26
2.1.2	Cálculo de elementos de matriz densidade	27
2.1.3	Matriz Densidade em estado de um <i>qubit</i>	27
2.1.4	Esfera de Bloch	28
2.2	A matriz densidade e os parâmetros de Stokes	31
2.2.1	Relação entre a matriz densidade e os parâmetros de Stokes	31
2.2.2	Parâmetros de Stokes para uma partícula com <i>spin</i> $\frac{1}{2}$	35
2.3	Algoritmo de <i>Machine Learning</i>	36
2.3.1	Regressão Linear	37
2.3.2	Regressão Polinomial	39
2.4	<i>Python: Qutip</i>	40
3	MODELO TEÓRICO	43
3.1	Visão Geral do modelo teórico	43
3.2	Formalismo matemático	43
3.2.1	Descrição do sistema quântico aberto	43
3.2.2	O Hamiltoniano do sistema	44
3.2.3	As bases do sistema	46
3.2.4	Dinâmica quântica do sistema	51
3.2.5	As probabilidades e os parâmetros de Stokes	53
3.2.6	Reconstrução dos elementos da matriz densidade	54
3.2.7	A parte real e a parte imaginária	56
4	SIMULAÇÃO DE EXPERIMENTOS E ANÁLISE	59

4.1	Simulação experimental e Detecção	59
4.1.1	Implementação experimental	59
4.1.2	Parâmetros experimentais	60
4.1.3	Detecção de estados, valores esperados e probabilidades	60
4.2	Resultados	61
4.2.1	Estados detectados	61
4.2.2	Gráficos	62
4.3	Discussão dos Resultados	62
4.3.1	Estados detectados	62
4.3.2	Gráficos	66
5	CONCLUSÃO	69
	REFERÊNCIAS	71

APÊNDICES **75**

APÊNDICE A	–	DINÂMICA QUÂNTICA DE UM SISTEMA ABERTO: EQUAÇÃO MESTRA DE LINDBLAD	77
A.0.1		Equação Mestra de Lindblad	77

ANEXOS **95**

ANEXO A	–	CÓDIGO DA SIMULAÇÃO EXPERIMENTAL . . .	97
----------------	----------	---	-----------

Introdução

A Mecânica Quântica (MQ) tem sido indispensável no estudo de sistemas de dimensões pequenas (sistema com tamanho de um átomo). É um ramo da física com vasta aplicação nos dispositivos que se usa no dia a dia tais como computadores e celulares, além de tecnologias como laser, lâmpadas de LED e ressonância magnética, só para citar alguns. Um sistema quântico é descrito pelo vetor de estado, $|\psi\rangle$, e é nele que toda a informação sobre o sistema se encontra em um jeito que permite o observador fazer melhor previsão estatística possível sobre quaisquer interações futuras (incluindo medidas) envolvendo o sistema (LVOVSKY; RAYMER, 2008). Os seus resultados mais intrigantes, como os fenômenos de superposição e emaranhamento, tem despertado a atenção dos cientistas desde últimas décadas do século XX. Os fenômenos mencionados passaram a ser vistos como ferramentas essenciais a serem utilizadas para desenvolvimento de novas tecnologias na área da Informação Quântica (IQ) e Computação Quântica (CQ) (NOVAES; STUDART, 2016).

A superposição de estados quânticos e emaranhamento quânticos apresentam vantagens não só no envio de informação e operação de computadores, mas também no processo de criptografia para uma comunicação segura de longas distâncias e também no processo de teletransporte. Sendo assim, o estudo de estados quânticos é de rica importância para exploração desses recursos (superposição e emaranhamento) que a MQ nos oferece. Por exemplo, o computador quântico, que opera na base de bit quântico, também chamado de *qubit*¹, apresenta vantagem na velocidade de processamento em comparação a computador clássico, uma vez que a informação é dada pela sequência superposta de estados (emaranhados ou não), o que faz com que contém mais informação que o bit (NOVAES; STUDART, 2016). Assim, pequenos computadores quânticos, capazes de realizar dezenas de operações com alguns *qubit* representam o progresso tecnológico em computação quântico (NIELSEN; CHUANG, 2002).

¹ *Qubit*, unidade de informação quântica descrita por um estado quântico. É análogo quântico de bit (unidade de informação para funcionamento de computador clássico). *Qubit* pode assumir os valores de estado $|0\rangle$, $|1\rangle$ ou a combinação linear de ambos os estados $a|0\rangle + b|1\rangle$ (diferente do bit que pode assumir apenas os valores 0 ou 1 (NOVAES; STUDART, 2016).

Além de vetor de estado, o sistema quântico pode ser descrito pelo Operador Densidade, ρ , comumente chamado de Matriz Densidade. Este operador descreve tanto estados quânticos puros quanto ensembles estatísticos e sistemas abertos, podendo descrever, por exemplo, transporte de carga e *spin* em sistemas fora do equilíbrio. Ainda, o formalismo de matriz densidade possibilita descrever decoerência e relaxação em sistemas quânticos.

Quando se está perante um sistema quântico de estado desconhecido e quer-se determinar a matriz densidade desse sistema, ρ , uma coisa a se fazer é realizar o processo de tomografia. A tomografia de estado quântico é um processo pelo qual qualquer sistema, incluindo *spin* de um elétron, pode ser caracterizado completamente usando um *ensemble* de várias partículas idênticas (ALTEPETER; JEFFREY; KWIAT, 2005), consiste na completa caracterização de um estado desconhecido através de uma série de medidas em diferentes bases (PIMENTA, 2010). Com série de medidas em um número grande suficiente de cópias preparadas identicamente de um sistema quântico, pode - se inferir, para uma aproximação razoável, o estado quântico do sistema (JAMES et al., 2001), isto é, pode-se combinar esses resultados para reconstruir a matriz densidade. Os dados não lançam o estado diretamente, mas pelo contrário indiretamente através das análises dos dados. Essa é a base de tomografia de estado quântico² (LVOVSKY; RAYMER, 2008).

O campo da tomografia de estado quântico surgiu no contexto de Óptica Quântica com desenvolvimentos para reconstrução de estados fotônicos (SCHILLER et al., 1996)(VOGEL; RISKEN, 1989). Em décadas passadas vários grupos aplicaram com sucesso a técnica de tomografia para a medida de sistemas quânticos (JAMES et al., 2001). Hoje em dia, a tomografia quântica tem sido aplicada para uma variedade de sistemas quânticos e vem sendo uma ferramenta padrão em pesquisa de IQ (LVOVSKY; RAYMER, 2008). No contexto de *spin* do elétron, regimes de tomografia óptico têm sido aplicados com sucesso para caracterizar estados de *spin* do elétron particular (SOUZA, 2021). A técnica tomográfica de rotação de Kerr foi desenvolvida para observar estados de *spin* de elétrons injetados opticamente em um poço quântico do semicondutor de poço quântico(KOSAKA et al., 2009). Bisognin *et al.* mostraram a reconstrução de estado quântico fermiônico através da corrente elétrica, portanto abrindo assim as possibilidades de tomografia baseada no transporte quântico(BISOGNIN et al., 2019). A reconstrução de estado de *qubit* é de fundamental importância para tecnologias, pois sua caracterização permite o estudo das propriedades tais como as probabilidades de possível resultado da medida, coerência e emaranhamento (CRAMER et al., 2010).

A primeira técnica experimental para determinar o estado de um sistema foi concebida por Sir George Gabriel Stokes, em 1852 (JAMES et al., 2001), quando descobriu que o comportamento da polarização pode ser descrito completamente por quatro quantidades

² Tomografia de estado é o procedimento experimental que determina um estado quântico desconhecido por realizar medidas no sistema e usar os dados da medida para reconstruir a matriz densidade do estado (NIELSEN; CHUANG, 2002).

mensuráveis conhecidas como Parâmetros de Stokes³ (GOLDSTEIN, 2003)(SANTOS, 2018). A medida de parâmetros de Stokes pode ser considerada equivalente a uma medida de tomografia da matriz densidade de um *ensemble* de *qubit* particulares (JAMES et al., 2001), isso reflete a relação entre a matriz densidade com os parâmetros de Stokes. Além de mais, a matriz densidade faz com que o método da descrição dos parâmetros de Stokes sejam mais simples quando se descreve o comportamento de um *ensemble* geral de fótons em propagação em espaço livre, bem como sob ação de uma interação com o ambiente (BERNARDO, 2017).

O presente trabalho surgiu como uma proposta teórica para reconstrução da matriz densidade de um único *qubit* de *spin* do elétron usando o transporte quântico de *spin* polarizado. O modelo consiste em um dispositivo quântico (*quantum dot*) baseado em um ponto quântico ligado a reservatórios ferromagnético totalmente polarizado com campo magnético ao longo da direção x na esfera de Bloch⁴. Pontos quânticos são estruturas semicondutoras de dimensões nanoscópica ($\approx 0 - 100\text{nm}$), assim chamados pela sua capacidade de confinar partículas nas três dimensões espaciais (ASSUNÇÃO et al., 2017). Eles e outros materiais semicondutores vem despertando interesse tecnológico nas últimas décadas (COUTINHO et al., 2013).

Em particular, muitos trabalhos sobre o transporte de *spin* através de pontos quânticos acoplados a eletrodos ferromagnéticos têm sido publicados (COUTINHO et al., 2013). Um exemplo desse tipo de trabalho se encontra na Fig. 1 que mostra um dispositivo que produz um transporte de corrente spin-polarizada através de pontos quânticos auto-organizados de InAs acoplados a reservatórios ferromagnéticos de Co (Cobalto) (HAMAYA et al., 2007). Um outro exemplo de sistema quântico pode ser visto na Fig. 2 onde temos um ponto quântico acoplado a eletrodos de alumínio (KATSAROS et al., 2010).

Os pontos quânticos são excelentes para se estudar diversos tipos de fenômenos quânticos, tais com a interação elétron - elétron, o efeito Kondo, a interação elétron - fônon, o acoplamento *spin* - órbita e o emaranhamento (ASSUNÇÃO et al., 2017). O interesse da comunidade científica na fabricação de dispositivos em escala molecular resultou no transporte de carga através de uma única molécula ligada a reservatórios (COUTINHO et al., 2013). Os diferentes tipos de pontos quânticos e suas diferentes propriedades são definidos pelos seus processos de formação, possuindo um espectro discreto de níveis de

³ Os parâmetros de Stokes, antes de serem usados no contexto da Óptica Quântica, eles foram usados, muito antes da criação da Mecânica Quântica, por Gabriel Stokes no contexto da Óptica Clássica com intuito de descrever a polarização de estado de radiação eletromagnética. Aliás, foi da Óptica Clássica que foram pegos emprestados para uso na Óptica Quântica. Na Óptica, a luz polarizada pode ser descrita usando os cálculos de Jones, descoberto por R. C. Jones em 1941. A luz polarizada é representada por um vetor de Jones, e elementos da óptica linear são representados por matrizes de Jones. Consultar (WIKIPÉDIA, 2018).

⁴ A esfera de Bloch é uma esfera unitária que oferece jeitos úteis de visualizar o estado de um único *qubit*. É usada para representar os vetores de estado quânticos. É uma representação geométrica do sistema quântico de dois níveis.

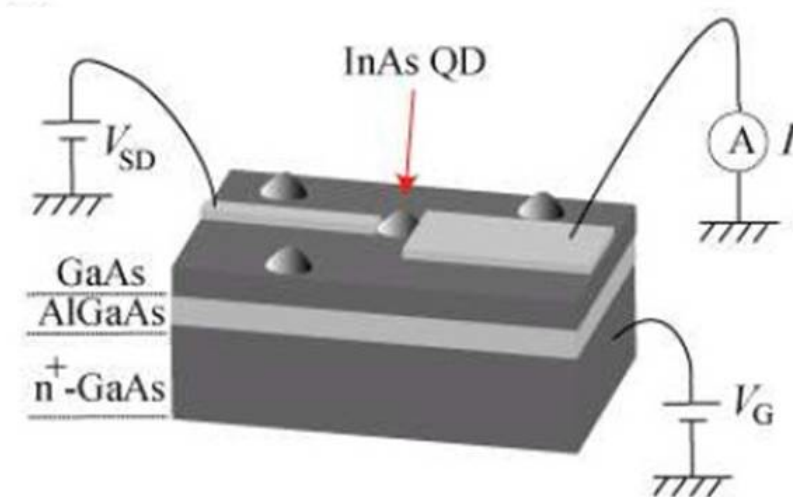


Figura 1 – Pontos Quânticos de InAs acoplados a reservatórios ferromagnético de Cobalto (Co) (HAMAYA et al., 2007).

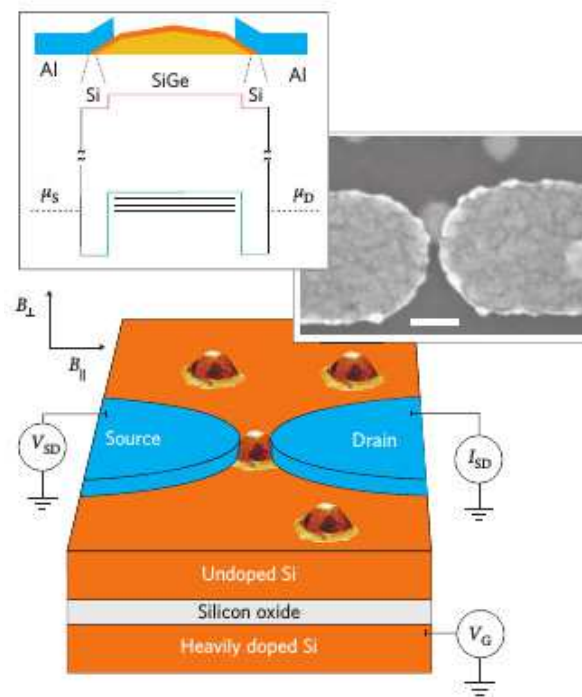


Figura 2 – Junção semicondutor - ponto quântico - semicondutor obtida pela criação de um contato entre nanocristal SiGe e eletrodos de alumínio (KATSAROS et al., 2010).

energia, podendo controlar o fluxo de entrada e saída de um único elétron (OLIVEIRA et al., 2015).

O intuito desse trabalho é investigar o processo de tunelamento de *spin* polarizado que fornece distribuição de probabilidade em diferentes eixos de quantização x_{\pm} , y_{\pm} e z_{\pm} , utilizar os parâmetros de Stokes para relacionar os elementos da matriz densidade

com as probabilidades da medida, e reconstruir assim a matriz densidade. Para essa finalidade, fizemos uma simulação experimental computacional usando *python* no qual criamos códigos que nos permitiram realizar a tomografia no sistema para geração dos dados que, a partir da dinâmica quântica do sistema, nos permitiram reconstruir a matriz densidade. Sendo um sistema aberto⁵, usamos a equação mestra de Lindblad, útil para descrever sistemas com dissipação, decoerência e relaxamento, para calcular a dinâmica do nosso sistema.

Por se tratar de um estudo pioneiro na área da IQ, esperamos que a presente dissertação sirva de referência para estudo de sistemas quânticos abertos e tomografia quântica. Esta dissertação propõe um modelo teórico para obtenção dos estados quânticos de um sistema a partir das probabilidades dos números de eventos de tunelamento. É importante destacar que o nosso modelo explora os conceitos como a decoerência, as amplitudes de probabilidades e fase relativa, conceitos úteis no estudo da Mecânica Quântica.

Para uma melhor compreensão, organizamos esta dissertação da seguinte forma: No capítulo 2 mostramos os conceitos teóricos que fundamentam a nossa pesquisa. Especificamente, na seção 2.1 definimos o operador densidade, de forma particular, na subseção 2.1.1 falamos de operador densidade reduzido, na subseção 2.1.2 mostramos as equações dos elementos da matriz densidade, na subseção 2.1.3 mostramos como é a matriz densidade em estado de um *qubit* e, na subseção 2.1.4 falamos da esfera de Bloch. Na seção 2.2 mostramos como relacionar a matriz densidade com os parâmetros de Stokes, na subseção 2.2.1 mostramos a equação que nos fornece essa relação e, na subseção 2.2.2, exemplificamos essa relação para uma partícula com *spin* $\frac{1}{2}$. Na seção 2.3, falamos sobre o algoritmo de *machine learning*, na subseção 2.3.1 conceituamos regressão linear e, na subseção 2.3.2 conceituamos a regressão polinomial, útil em análise da qualidade do modelo experimental. Na seção 2.4 introduzimos as principais bibliotecas que usamos para execução dos códigos em *python*.

No capítulo 3 trouxemos a proposta matemática do modelo teórico para reconstrução da matriz densidade. Especificamente, na seção 3.1 fizemos a descrição geral do modelo de modo a situar melhor o leitor. Na seção 3.2 sobretudo na subseção 3.2.1 fizemos a descrição detalhada do sistema quântico em estudo, na subseção 3.2.2 fizemos a descrição matemática do modelo em que descrevemos o hamiltoniano do sistema, na subseção 3.2.3 descrevemos a base do estado do sistema, na subseção 3.2.4 mostramos a equação que descreve a dinâmica do nosso sistema, na subseção 3.2.5 mostramos a equação que relaciona os parâmetros de Stokes com as probabilidades e, na subseção 3.2.6 mostramos as equações que relacionam os elementos da matriz densidade com as probabilidades que

⁵ Sistema interagindo com o ambiente. Nesse tipo de sistema ocorre a decoerência (perda de coerência quântica) levando assim a destruição de superposição quântica. A decoerência é o principal desafio para desenvolvimento de tecnologias quânticas e tem surgido técnicas experimentais moderna que permitem a sua observação e seu controle. (BREUER; PETRUCCIONE et al., 2002)(JOOS et al., 2013)

nos permitiu reconstruir a matriz densidade.

No capítulo 4 fizemos a descrição detalhada da simulação experimental computacional do sistema. Especificamente, na seção 4.1 sobretudo na subseção 4.1.1 descrevemos como foi feita a simulação e detecção em que começamos por falar como fizemos a implementação experimental, na subseção 4.1.2 mostramos os valores dos parâmetros que usamos durante a simulação, na subseção 4.1.3 explicamos como obtemos estados do sistema, valores esperados e as probabilidades. Na seção 4.2 mostramos os resultados do experimento, na subseção 4.2.1 mostramos o resultado dos estados detectados e, na subseção 4.2.2 mostramos os gráficos gerados. Na seção 4.3 fizemos a discussão dos resultados obtidos, na subseção 4.3.1 fizemos a discussão sobre os estados detectados e, na subseção 4.3.2 discutimos sobre o significado físico dos gráficos. No capítulo 5, apresentamos nossa conclusão. No apêndice A, apresentamos a dedução da equação mestra de Lindblad em detalhes, descrevendo assim a dinâmica quântica do sistema aberto. Colocamos no anexo A os códigos que desenvolvemos para simular o sistema.

Fundamentação Teórica

Nesse capítulo abordaremos os conceitos de matriz densidade, esfera de Bloch, equação de Lindblad, parâmetros de Stokes e *machine learning*. Mais especificamente definiremos a matriz densidade e veremos como é a sua operação no estado de um *qubit*. Demonstraremos a equação de Lindblad baseada nas aproximações de Born - Markov. Demonstraremos também a equação que relaciona a matriz densidade com os parâmetros de Stokes.

2.1 Operador Densidade

Em Mecânica Quântica, um sistema é descrito por um vetor de estado $|\psi\rangle$ ou um operador densidade ρ que permite prever estatisticamente o sistema no futuro. Sendo assim, é de fundamental importância ter o domínio de inicialização, controle e detecção de estados quânticos. Para determinar o estado de um sistema em um dado instante é necessário realizar medidas correspondentes a um conjunto completo de observáveis que comutam entre si.

O operador densidade é definido matematicamente como,

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|, \quad (1)$$

representado na base $\{|u_n\rangle\}$ por uma matriz chamada de **Matriz Densidade** cujos elementos são

$$\rho_{pn} = \langle u_p|\rho|u_n\rangle = C_n C_p^*. \quad (2)$$

O valor médio de um observável A é calculado pela seguinte equação

$$\langle A \rangle = Tr\{A\rho\} = Tr\{\rho A\}. \quad (3)$$

A probabilidade da medida resultar no valor a_n é dada por

$$\mathcal{P}(a_n) = Tr\{P_n\rho\}, \quad (4)$$

onde $P_n = |u_n\rangle\langle u_n|$ é o operador projeção. A conservação de probabilidade é dada por

$$Tr(\rho) = 1, \quad (5)$$

onde Tr indica o **traço** - a soma dos elementos diagonais da matriz densidade.

Tomando a derivada temporal na Eq. (1) podemos deduzir a equação que expressa a evolução temporal de $\rho(t)$ da seguinte forma:

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \frac{d}{dt}(|\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|), \quad (6)$$

que pela regra de produto da derivada fica

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \left(\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\right) \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle \left(\frac{d}{dt}\langle \psi(t)|\right). \quad (7)$$

A equação de Schrödinger diz que

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}H|\psi(t)\rangle, \quad (8)$$

substituir a Eq. (8) em (7) temos

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \frac{1}{i\hbar} \{H|\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| - |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|H\}, \quad (9)$$

e usando a relação de comutação de operadores $[A, B] = AB - BA$ e a Eq. (1) temos que

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho(t)]. \quad (10)$$

A Eq. (10) é conhecida como equação de von Neumann¹. Ela é útil na análise da dinâmica de sistemas fechados - sistemas sem interação com o ambiente (reservatório). O Hamiltoniano total é formado unicamente pelo Hamiltoniano do sistema ($H_{tot} = H_{sis}$).

Um operador é dito operador densidade se, somente se, satisfizer as seguintes condições (NIELSEN; CHUANG, 2002):

1. ρ é um operador positivo ;
2. ρ tem traço igual a 1 .

A primeira traz a condição de positividade, isto é, um operador tem que ser sempre positivo, além de ser Hermitiano ($\rho = \rho^\dagger$). Isso pode ser provado da seguinte forma:

Prova 1: Suponha que $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ seja um operador densidade onde p_i é a probabilidade de sistema estar em i -ésimo estado, e com φ sendo um vetor de estado arbitrário, então, o valor médio é dado por

$$\langle \varphi | \rho | \varphi \rangle = \sum_i p_i \langle \varphi | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \varphi \rangle \quad (11)$$

$$\langle \varphi | \rho | \varphi \rangle = \sum_i p_i |\langle \varphi | \psi_i \rangle|^2 \quad (12)$$

$$\langle \varphi | \rho | \varphi \rangle \geq 0, \quad (13)$$

¹ Análoga a equação de Schrödinger que descreve a dinâmica de sistema no formalismo de vetor de estado.

assim se verifica a veracidade da primeira condição.

A segunda traz a condição de que o traço de ρ deve ser sempre igual a 1, que é simplesmente a conservação de probabilidade. A prova disso se faz de seguinte forma:

Prova 2: Aplicando o traço em ρ temos

$$Tr(\rho) = \sum_i p_i Tr(|\psi_i\rangle \langle \psi_i|). \quad (14)$$

Trabalhado $|\psi_i\rangle$ na base de vetor de estado $|\psi_j\rangle$, temos

$$Tr(\rho) = \sum_i \sum_j p_i \langle \psi_j | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \psi_j \rangle, \quad (15)$$

sendo que $\langle \psi_j | \psi_i \rangle = \delta_{ji}$ temos

$$Tr(\rho) = \sum_i \sum_j p_i \delta_{ji} \delta_{ij}, \quad (16)$$

com

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases}, \quad (17)$$

a equação (16) fica

$$Tr(\rho) = \sum_i p_i, \quad (18)$$

e como a soma de todas as probabilidades de estado de sistema é sempre 1, logo,

$$Tr(\rho) = 1, \quad (19)$$

então a condição de traço é satisfeita também. Assim demonstramos as condições 1 e 2. Em resumo, o operador densidade é um operador Hermitiano, positivo e de traço igual a 1.

Um conceito muito importante que devemos explorar é o conceito de estado puro e estado misto (ou mistura estatística). O estado puro é dado por $\rho = |\psi\rangle \langle \psi|^2$. Em um estado puro $Tr(\rho^2) = 1$. Podemos provar isso da seguinte forma:

$$Tr(\rho^2) = Tr(|\psi\rangle \langle \psi | \psi \rangle \langle \psi |). \quad (20)$$

Pela relação de ortonormalidade de estado ψ , $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ daí

$$Tr(\rho^2) = Tr(|\psi\rangle \langle \psi |). \quad (21)$$

Mas, $Tr(\rho) = Tr(|\psi\rangle \langle \psi |) = 1$, então

$$Tr(\rho^2) = Tr(\rho) = 1. \quad (22)$$

² A vantagem de usar o operador densidade em alguns casos de sistema com estado puro é que evita a redundância de estado sobre esses sistema eliminando uma fase global arbitrária. Por exemplo, seja $|\psi\rangle$ e $|\bar{\psi}\rangle = e^{i\varphi} |\psi\rangle$ estados de um sistema. Seja $\bar{\rho} = |\bar{\psi}\rangle \langle \bar{\psi}| \equiv e^{i\varphi} e^{-i\varphi} |\psi\rangle \langle \psi| = |\psi\rangle \langle \psi| = \rho$. Isso mostra que esses estados são iguais e descrevem mesmo sistema físico.

Em contraste, o estado misto é dado por $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ ³ onde $\sum_i p_i = 1$ representa a probabilidade de cada estado. Em uma estado misto $Tr(\rho^2) < 1$ (COHEN-TANNOUJJI; DIU; LALOE, 1986)(NIELSEN; CHUANG, 2002). Podemos provar isso da seguinte forma:

$$Tr(\rho^2) = \sum_i \sum_j p_i p_j Tr(|\psi_i\rangle \langle \psi_i| \psi_j\rangle \langle \psi_j|), \quad (23)$$

onde $\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}$. Usando o conceito de δ_{ij} (Eq. (17)), a Eq. (23) fica

$$Tr(\rho^2) = \sum_i p_i^2 Tr(|\psi_i\rangle \langle \psi_i|), \quad (24)$$

que pode ser reescrita como

$$Tr(\rho^2) = \sum_i p_i^2 Tr(\rho_i), \quad (25)$$

onde $\rho_i = |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ é o projetor sobre o espaço gerado por $|\psi_i\rangle$, onde usamos $Tr(\rho_i) = 1$. Como $0 \leq p_i \leq 1$ e $\sum_i p_i = 1$, podemos concluir que

$$Tr(\rho^2) < 1. \quad (26)$$

Então para saber se um sistema está em um estado puro ou em uma mistura estatística basta verificar o resultado de quadrado de traço de operador densidade, se for igual a 1 o estado é puro, e se for menor que 1 é uma mistura estatística.

2.1.1 Operador densidade reduzido

Quando estamos perante um sistema quântico composto por vários subsistemas a descrição do sistema é dado pelo operador densidade reduzido. O operador densidade reduzido é definido por

$$\rho^A \equiv Tr_B\{\rho^{AB}\} \quad (27)$$

$$\rho^B \equiv Tr_A\{\rho^{AB}\}, \quad (28)$$

onde podemos ver que o operador densidade de subsistema $A(B)$ é definido a partir do traço tomado nos graus de liberdade do subsistema $B(A)$.

O traço parcial sobre os graus de liberdade de sistema B é dado por

$$Tr_B\{|a_1 b_1\rangle \langle a_2 b_2|\} \equiv |a_1\rangle \langle a_2| Tr_B\{|b_1\rangle \langle b_2|\}, \quad (29)$$

onde os vetores da equação (29) correspondem a vetores de estado de cada subsistema⁴.

A operação de traço parcial de operador densidade sobre subsistemas é a forma adequada de analisar as propriedades quânticas dos sistemas compostos.

³ O operador densidade é dado pela soma de vários estados em uma mistura estatística.

⁴ Na forma explícita de anotação de produto tensorial $|a_1 b_1\rangle \langle a_2 b_2| = |a_1\rangle \langle a_2| \otimes |b_1\rangle \langle b_2|$.

2.1.2 Cálculo de elementos de matriz densidade

A equação que descreve os elementos diagonais é dada por

$$\rho_{nn} = \sum_i p_i |C_n^{(i)}|^2, \quad (30)$$

onde $|C_n^{(i)}|^2 = |\langle u_n | \psi_i \rangle|^2$ é um número real positivo que representa a probabilidade de medir o sistema no estado $|u_n\rangle$. Sendo assim, ρ_{nn} é um número real positivo, igual a zero se, e somente se, todos $|C_n^{(i)}|^2$ forem iguais a zero, e representa a probabilidade de encontrar o sistema no estado $|u_n\rangle$. ρ_{nn} é chamado de **população de estado** $|u_n\rangle$ (COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOE, 1986).

Os elementos não diagonais são dados por

$$\rho_{pn} = \sum_i p_i C_n^{(i)} C_p^{(i)*}, \quad (31)$$

onde $C_n^{(i)} C_p^{(i)*}$ é o termo de cruzamento que expressa efeitos da interferência entre estados $|u_n\rangle$. Assim, ρ_{np} representa a média de termo de cruzamento, assumindo assim todos os estados possíveis da mistura estatística. ρ_{np} podem ser zeros ou complexos. Quando o ρ_{np} é zero significa que a média cancelou qualquer efeitos de interferência entre $|u_n\rangle$ e $|u_p\rangle$, mas quando é diferente de zero significa que existe uma certa coerência entre esses estados. Por isso ρ_{np} é frequentemente chamado de **coerência** (COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOE, 1986).

2.1.3 Matriz Densidade em estado de um *qubit*

Quantum bits ou simplesmente *qubits* são concepções fundamentais da Computação Quântica e Informação Quântica. Em outras palavras, são blocos fundamentais para operação de computadores quânticos através de envio de informação de um estado para outro. Diferente dos *bits* que operam em estados 0 e 1, os *qubits* operam em termo de estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$. Os estados de *qubits* podem formar uma combinação linear de estados resultando em

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle, \quad (32)$$

com a probabilidade de sistema estar no estado $|0\rangle$ igual a $|\alpha|^2$ e probabilidade do sistema estar no estado $|1\rangle$ igual a $|\beta|^2$ sendo que $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, onde α e β são números complexos.

Em termos de uma matriz densidade, um estado geral de um *qubit* é representado por um operador densidade agindo em um espaço de estado \mathbf{C}^2 . O conjunto dos operadores hermitianos é um espaço vetorial real e uma base para esse espaço é formado pelos operadores de Pauli

$$\sigma_1 = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (33)$$

onde $\sigma_0 = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ é o operador identidade. Um operador densidade de um *qubit* pode ser sempre escrito na forma (AMARAL; BARAVIERA; CUNHA, 2011)

$$\rho = \frac{1}{2}(I + a\sigma_1 + b\sigma_2 + c\sigma_3), \quad (34)$$

onde a , b , e c são números reais.

Em termo da representação matricial temos

$$\rho = \frac{1}{2} \left\{ \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + a \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + b \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} + c \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \right\} \quad (35)$$

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1+c & a-ib \\ a+ib & 1-c \end{bmatrix}, \quad (36)$$

para que ρ seja sempre positivo

$$\det(\rho) \geq 0, \quad (37)$$

logo

$$\frac{1}{2} \det \begin{bmatrix} 1+c & a-ib \\ a+ib & 1-c \end{bmatrix} \geq 0, \quad (38)$$

calcular o determinante da Eq. (38) temos

$$\frac{1}{2} \{(1+c)(1-c) - (a-ib)(a+ib)\} \geq 0, \quad (39)$$

logo,

$$a^2 + b^2 + c^2 \leq 1. \quad (40)$$

Acabamos de demonstrar que o operador de um *qubit* satisfaz as propriedades do o operador densidade conforme demonstramos no início dessa seção⁵.

2.1.4 Esfera de Bloch

A esfera de Bloch é uma esfera unitária de raio 1 com polos opostos correspondendo a um par de vetores de estado mutuamente ortogonais. Os polos norte e sul da esfera de Bloch são tipicamente escolhidos para corresponder aos vetores de base padrão e que por sua vez podem corresponder, por exemplo, aos estados de spin para cima ($|\uparrow\rangle = |0\rangle$) e spin para baixo ($|\downarrow\rangle = |1\rangle$) de um elétron, como mostra a figura 3.

A esfera de Bloch oferece jeitos úteis de visualizar o estado de um único *qubit* (NIELSEN; CHUANG, 2002), fazendo uma associação bijetiva entre operadores densidade de um *qubit* e pontos na esfera de raio 1 em \mathbf{R}^3 . Os pontos que estão em cima dos eixos na esfera correspondem aos operadores que possuem determinantes igual a zero, que nesse

⁵ ρ é um operador densidade, pois pela equação (34) podemos ver que o traço é igual a 1, pela equação (36) podemos ver que ele é hermitiano e pela equação (40) podemos ver que ele é sempre positivo.

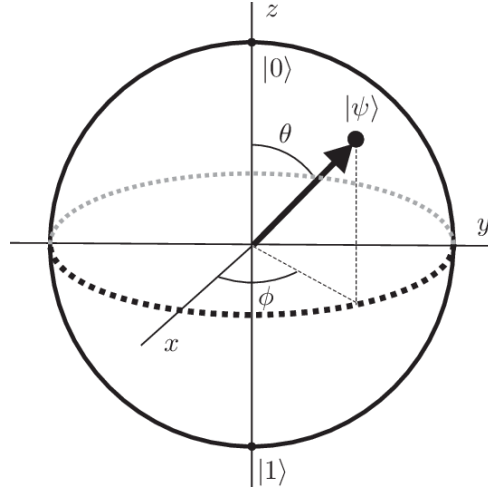


Figura 3 – Estado $|\psi\rangle$ de um *qubit* representado no ponto da esfera de Bloch (BARCELOS; ANDRADE; BOAVENTURA,)

caso são exatamente os estados puros (AMARAL; BARAVIERA; CUNHA, 2011). Os pontos que estão no interior da esfera correspondem aos operadores com estados mistos, estados que são combinações lineares entre si. A esfera de Bloch frequentemente serve como um excelente marco conceitual para a discussão de ideias sobre a CQ e a IQ (NIELSEN; CHUANG, 2002).

Podemos reescrever o estado de um *qubit* dado pela Eq. (32) fazendo $\alpha = ae^{ir_1}$ e $\beta = be^{ir_2}$, onde a e b são números reais e r_1 e r_2 são raios que ligam a origem ao estado $|0\rangle$ e $|1\rangle$, respectivamente. Substituir essa informação na Eq. (32), temos

$$|\psi\rangle = ae^{ir_1} |0\rangle + be^{ir_2} |1\rangle, \quad (41)$$

multiplicar por e^{-ir_1} , temos

$$|\psi\rangle = a |0\rangle + be^{i(r_2-r_1)} |1\rangle, \quad (42)$$

chamando $\phi = r_2 - r_1$, temos

$$|\psi\rangle = a |0\rangle + be^{i\phi} |1\rangle, \quad (43)$$

onde $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Chamando $a = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)$ e $b = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$, temos a representação de estado de um *qubit* da Eq. (32) na esfera de Bloch como

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle, \quad (44)$$

onde θ e ϕ são variáveis reais que definem um ponto na esfera unitária 3D, como mostra a Fig. 3. A matriz densidade que representa esse estado é dada por

$$\rho = |\psi\rangle \langle\psi|, \quad (45)$$

pela Eq. (44) temos

$$\rho = \left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\phi} \text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle \right) \left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \langle 0| + e^{-i\phi} \text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) \langle 1| \right), \quad (46)$$

manipulando fica

$$\rho = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle \langle 0| + e^{-i\phi} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle \langle 1| + e^{i\phi} \text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle \langle 1| + \text{sen}^2\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle \langle 1|, \quad (47)$$

sendo que $\text{sen}(x)\cos(x) = \frac{1}{2}\text{sen}(2x)$, chamando $x = \frac{\theta}{2}$, temos $\text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{1}{2}\text{sen}(\theta)$, substituir essa informação temos

$$\rho = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle \langle 0| + \frac{1}{2}e^{-i\phi} \text{sen}(\theta) |0\rangle \langle 1| + \frac{1}{2}e^{i\phi} \text{sen}(\theta) |0\rangle \langle 1| + \text{sen}^2\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle \langle 1|, \quad (48)$$

na representação matricial fica

$$\rho = \begin{pmatrix} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) & \frac{1}{2}e^{-i\phi} \text{sen}(\theta) \\ \frac{1}{2}e^{i\phi} \text{sen}(\theta) & \text{sen}^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix}, \quad (49)$$

onde podemos ver que a soma dos elementos de diagonal, correspondente ao traço, é igual a 1. Pelo elementos fora de diagonal podemos ver que é hermitiano ($\rho = \rho^\dagger$). Podemos demonstrar também que ρ é sempre positivo usando a desigualdade de Cauchy - Schwarz que garante que, para quaisquer vetor $|u\rangle$, o produto interno por ele mesmo é sempre maior ou igual a zero, isto é,

$$\langle u, u \rangle \geq 0, \quad (50)$$

sendo $|u\rangle = |x + y\rangle$ temos

$$\langle x + y, x + y \rangle \geq 0, \quad (51)$$

isto é,

$$\langle x, x \rangle + \langle y, y \rangle + \langle x, y \rangle + \langle y, x \rangle \geq 0, \quad (52)$$

chamando vetor $|x\rangle = \begin{pmatrix} a \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ 0 \end{pmatrix}$ e $|y\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ b e^{-i\phi} \text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix}$, onde a e b são números reais, temos os seguintes resultados dos produtos internos da equação acima

$$|a|^2 \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + |b|^2 \text{sen}^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \frac{a^*b}{2} e^{-i\phi} \text{sen}(\theta) + \frac{b^*a}{2} e^{i\phi} \text{sen}(\theta) \geq 0, \quad (53)$$

isto é,

$$|a|^2 \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + |b|^2 \text{sen}^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \frac{2\text{sen}(\theta)}{2} \text{Re} [a^* b e^{-i\phi}] \geq 0, \quad (54)$$

onde $2\text{Re} [a^* b e^{-i\phi}] = \frac{a^*b}{2} e^{-i\phi} \text{sen}(\theta) + \frac{b^*a}{2} e^{i\phi} \text{sen}(\theta)$, assim,

$$|a|^2 \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + |b|^2 \text{sen}^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \geq \text{sen}(\theta) \text{Re} [a^* b e^{-i\phi}], \quad (55)$$

o que prova que para qualquer a e $b \neq 0$ o operador densidade ρ será sempre positivo.

2.2 A matriz densidade e os parâmetros de Stokes

Nesta seção mostraremos as equações que relacionam os elementos da matriz densidade com os parâmetros de Stokes, relação útil na investigação de estados polarizados de um sistema quântico e também na investigação de *ensemble* de um sistema. A polarização consiste em filtrar ou selecionar estado polarizado de um sistema mediante a orientação de um objeto chamado de polarizador, permitindo, assim, estudar os estados isolados de interesse durante uma prática experimental. Os parâmetros de Stokes representam as amplitudes de probabilidade do estado geral de um sistema colapsar em um dos possíveis autoestados de polarização após a medição (FERREIRA, 2022). A Teoria da Ciência de Informação começa com a observação que há uma ligação fundamental entre probabilidades e informações (BARNETT, 2009).

2.2.1 Relação entre a matriz densidade e os parâmetros de Stokes

Considerando os feixes de luz polarizado como sendo um *ensemble* de um sistema quântico, podemos verificar que há uma relação direta entre a medida da polarização de estado de um feixe de luz a partir dos parâmetros de Stokes e a medida da matriz densidade de um ensemble criado pelos feixes de luz de um sistema quântico de dois níveis.

Em uma tomografia de único *qubit*, os parâmetros de Stokes foram definidos a partir de um conjunto de quatro medidas de intensidade em que a 1ª foi feita com um filtro que transmite 50% da radiação incidente, sem se importar com a sua polarização; a 2ª foi feita com um polarizador que transmite apenas a luz polarizada horizontalmente; a 3ª foi feita com um polarizador que transmite apenas a luz polarizada em 45° ao horizontal; e 4ª foi feita com um polarizador que transmite apenas a luz polarizada direita-circular⁶. Com isso, os números de fótons contados pelo detector para cada caso foram ⁷

$$n_0 = \frac{\mathcal{N}}{2} (\langle H|\rho|H\rangle + \langle V|\rho|V\rangle) = \frac{\mathcal{N}}{2} (\langle R|\rho|R\rangle + \langle L|\rho|L\rangle), \quad (56)$$

$$n_1 = \mathcal{N} (\langle H|\rho|H\rangle) = \frac{\mathcal{N}}{2} (\langle R|\rho|R\rangle + \langle R|\rho|L\rangle + \langle L|\rho|R\rangle + \langle L|\rho|L\rangle), \quad (57)$$

$$n_2 = \mathcal{N} (\langle \bar{D}|\rho|\bar{D}\rangle) = \frac{\mathcal{N}}{2} (\langle R|\rho|R\rangle + \langle L|\rho|L\rangle + i \langle R|\rho|L\rangle - i \langle L|\rho|R\rangle), \quad (58)$$

$$n_3 = \frac{\mathcal{N}}{2} (\langle R|\rho|R\rangle), \quad (59)$$

onde $|H\rangle$ representa *qubit* polarizado na linha horizontal, $|V\rangle$ representa *qubit* polarizado na linha vertical, $|\bar{D}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|H\rangle - |V\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\pi/4} (|R\rangle + i|L\rangle)$ representa *qubit* na linha

⁶ Usa-se a esfera de Poicaré para representar o estado da luz polarizada, que é análoga a esfera de Bloch que definimos aqui.

⁷ Ver o artigo da referência (JAMES et al., 2001) para mais detalhes.

diagonal (45°), e $|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|H\rangle - i|V\rangle)$ representa *qubit* no sentido direita circular. ρ é a matriz densidade (2x2) para os graus de polarização da luz (ou para um sistema quântico de dois níveis), e \mathcal{N} é uma constante dependente da eficiência de detector e intensidade da luz.

Os parâmetros de Stokes a partir dos números de fótons contados são dados por

$$S_0 \equiv 2n_0 = \mathcal{N} (\langle R|\rho|R\rangle + \langle L|\rho|L\rangle), \quad (60)$$

$$S_1 \equiv 2(n_1 - n_0) = \mathcal{N} (\langle R|\rho|L\rangle + \langle L|\rho|R\rangle), \quad (61)$$

$$S_2 \equiv 2(n_2 - n_0) = i\mathcal{N} (\langle R|\rho|L\rangle - \langle L|\rho|R\rangle), \quad (62)$$

$$S_3 \equiv 2(n_3 - n_0) = \mathcal{N} (\langle R|\rho|R\rangle - \langle L|\rho|L\rangle). \quad (63)$$

A relação entre as matrizes densidades e os parâmetros de Stokes se dá pela seguinte equação

$$\rho = \frac{1}{2S_0} \sum_{i=0}^3 S_i \sigma_i, \quad (64)$$

onde S_i são parâmetros de Stokes e σ_i são operadores de Pauli que em termo da representação de $|R\rangle$ e $|L\rangle$ são dados por $\sigma_1 = |R\rangle\langle L| + |L\rangle\langle R|$, $\sigma_2 = i(|L\rangle\langle R| - |R\rangle\langle L|)$, $\sigma_3 = |R\rangle\langle R| - |L\rangle\langle L|$, e $\sigma_0 = |R\rangle\langle R| + |L\rangle\langle L|$ é operador identidade. Generalizando para vários estados de *qubit* temos a seguinte relação:

$$\rho = \frac{1}{2^n S_{0,0,\dots,0}} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n=0}^3 S_{i_1, i_2, \dots, i_n} \sigma_{i_1} \otimes \sigma_{i_2} \otimes \dots \otimes \sigma_{i_n}. \quad (65)$$

Podemos demonstrar que a Eq. (64) se resume a uma equação de matriz densidade conhecida da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{2S_0} (S_0\sigma_0 + S_1\sigma_1 + S_2\sigma_2 + S_3\sigma_3) \\ &= \frac{\mathcal{N} (\langle R|\rho|R\rangle + \langle L|\rho|L\rangle) (|R\rangle\langle R| + |L\rangle\langle L|)}{2\mathcal{N} (\langle R|\rho|R\rangle + \langle L|\rho|L\rangle)} \\ &+ \frac{\mathcal{N} (\langle R|\rho|L\rangle + \langle L|\rho|R\rangle) (|R\rangle\langle L| + |L\rangle\langle R|)}{2\mathcal{N} (\langle R|\rho|R\rangle + \langle L|\rho|L\rangle)} \\ &+ \frac{i\mathcal{N} (\langle R|\rho|L\rangle - \langle L|\rho|R\rangle) (i(|L\rangle\langle R| - |R\rangle\langle L|))}{2\mathcal{N} (\langle R|\rho|R\rangle + \langle L|\rho|L\rangle)} \\ &+ \frac{\mathcal{N} (\langle R|\rho|R\rangle - \langle L|\rho|L\rangle) (|R\rangle\langle R| - |L\rangle\langle L|)}{2\mathcal{N} (\langle R|\rho|R\rangle + \langle L|\rho|L\rangle)}, \end{aligned} \quad (66)$$

usando conceito de traço podemos ver que o denominador vai a 1, isto é, para $Tr = \sum_{i=R}^L \langle i|i\rangle$, temos

$$\begin{aligned} (\langle R|\rho|R\rangle + \langle L|\rho|L\rangle) &= \sum_{i=R}^L \langle i|\rho|i\rangle \\ &= Tr\rho \\ &= 1, \end{aligned} \quad (67)$$

fazendo a distributiva em Eq. (66) temos

$$\begin{aligned}
\rho &= \frac{1}{2} [\langle R|\rho|R\rangle |R\rangle \langle R| + \langle R|\rho|R\rangle |L\rangle \langle L| + \langle L|\rho|L\rangle |R\rangle \langle R| + \langle L|\rho|L\rangle |L\rangle \langle L|] \\
&+ \frac{1}{2} [\langle R|\rho|L\rangle |R\rangle \langle L| + \langle R|\rho|L\rangle |L\rangle \langle R| + \langle L|\rho|R\rangle |R\rangle \langle L| + \langle L|\rho|R\rangle |L\rangle \langle R|] \\
&- \frac{1}{2} [\langle R|\rho|L\rangle |L\rangle \langle R| + \langle R|\rho|L\rangle |R\rangle \langle L| + \langle L|\rho|R\rangle |L\rangle \langle R| - \langle L|\rho|R\rangle |R\rangle \langle L|] \\
&+ \frac{1}{2} [\langle R|\rho|R\rangle |R\rangle \langle R| - \langle R|\rho|R\rangle |L\rangle \langle L| - \langle L|\rho|L\rangle |R\rangle \langle R| + \langle L|\rho|L\rangle |L\rangle \langle L|],
\end{aligned} \tag{68}$$

simplicando termos semelhantes temos

$$\begin{aligned}
\rho &= \frac{2}{2} [\langle R|\rho|R\rangle |R\rangle \langle R| + \langle L|\rho|L\rangle |L\rangle \langle L| + \langle R|\rho|L\rangle |R\rangle \langle L| + \langle L|\rho|R\rangle |L\rangle \langle R|] \\
&= \langle R|\rho|R\rangle |R\rangle \langle R| + \langle L|\rho|L\rangle |L\rangle \langle L| + \langle R|\rho|L\rangle |R\rangle \langle L| + \langle L|\rho|R\rangle |L\rangle \langle R|,
\end{aligned} \tag{69}$$

que em termo da base $|i\rangle$ e $|j\rangle$ fica

$$\rho = \sum_{i,j=L}^R \rho_{ij} |i\rangle \langle j|, \tag{70}$$

onde $\rho_{ij} = \langle i|\rho|j\rangle$ são elementos da matriz densidade correspondendo ao peso de probabilidade e $|i\rangle \langle j|$ são estados relacionados ao operador densidade ρ . Acabamos de mostrar que a relação da Eq. (64) é válida.

Da Eq. (64) podemos mostrar que

$$\rho = \frac{1}{2} \left\{ \frac{S_0}{S_0} \sigma_0 + \frac{1}{S_0} \sum_{i=1}^2 S_i \sigma_i \right\}, \tag{71}$$

multiplicar ambos os lados por σ_i e lembrando que $S_0 = Tr\rho = 1$, temos

$$\sigma_i \rho = \frac{1}{2} \left\{ \sigma_i \sigma_0 + \sum_{i=1}^2 S_i \sigma_i \sigma_i \right\}, \tag{72}$$

Tomando o traço em ambos os lados, temos

$$Tr(\sigma_i \rho) = \frac{1}{2} \left\{ Tr(\sigma_i \sigma_0) + \sum_{i=1}^2 S_i Tr(\sigma_i \sigma_i) \right\}. \tag{73}$$

Mas, $Tr(\sigma_i \sigma_0) = 0$ para $i \neq 0$ e $Tr(\sigma_i \sigma_i) = 2$, então

$$S_i = Tr(\sigma_i \rho), \tag{74}$$

com $S_i = \{S_0, S_1, S_2, S_3\}$ e $\sigma_i = \{\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$.

A Eq. (64) e (74) mostram a conexão entre os parâmetros de Stokes com os elementos de matriz densidade, nelas podemos verificar que podemos estudar estado de um sistema a partir das diferentes formas de polarização⁸. Podemos demonstrar que para uma matriz

⁸ Cada parâmetro de Stokes representa um tipo de polarização e são análogos as médias das matrizes de Pauli para a polarização (SANTOS, 2018).

densidade dada por $\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix}$ e pela matrizes de Pauli (equação (33)) a relação entre os parâmetros de Stokes e matrizes densidade ficam: para $i = 0$

$$\begin{aligned}
 S_0 &= \text{Tr}(\sigma_0 \rho) \\
 &= \text{Tr} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \right] \\
 &= \text{Tr} \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \\
 &= \rho_{11} + \rho_{22},
 \end{aligned} \tag{75}$$

para $i = 1$

$$\begin{aligned}
 S_1 &= \text{Tr}(\sigma_1 \rho) \\
 &= \text{Tr} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \right] \\
 &= \text{Tr} \begin{pmatrix} \rho_{21} & \rho_{22} \\ \rho_{11} & \rho_{12} \end{pmatrix} \\
 &= \rho_{21} + \rho_{12},
 \end{aligned} \tag{76}$$

para $i = 2$

$$\begin{aligned}
 S_2 &= \text{Tr}(\sigma_2 \rho) \\
 &= \text{Tr} \left[\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \right] \\
 &= \text{Tr} \begin{pmatrix} -i\rho_{21} & \rho_{22} \\ \rho_{11} & i\rho_{12} \end{pmatrix} \\
 &= i[\rho_{12} - \rho_{21}],
 \end{aligned} \tag{77}$$

para $i = 3$

$$\begin{aligned}
 S_3 &= \text{Tr}(\sigma_3 \rho) \\
 &= \text{Tr} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \right] \\
 &= \text{Tr} \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & -\rho_{22} \end{pmatrix} \\
 &= \rho_{11} - \rho_{22},
 \end{aligned} \tag{78}$$

em termo da representação de vetores de Stokes fica

$$\vec{S} = \begin{pmatrix} S_0 \\ S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{11} + \rho_{22} \\ \rho_{12} + \rho_{21} \\ i[\rho_{12} - \rho_{21}] \\ \rho_{11} - \rho_{22} \end{pmatrix}. \tag{79}$$

2.2.2 Parâmetros de Stokes para uma partícula com $spin \frac{1}{2}$

Para uma partícula com $spin \frac{1}{2}$ cuja matriz densidade dada pela Eq. (49)

$$\begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) & \frac{1}{2}e^{-i\phi}\text{sen}(\theta) \\ \frac{1}{2}e^{i\phi}\text{sen}(\theta) & \text{sen}^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix}, \quad (80)$$

podemos associar cada parâmetro de Stokes com a orientação do $spin$ de partícula ao longo do eixo x , y e z . Para isso, podemos ver que a soma entre "populações"

$$\begin{aligned} \rho_{11} + \rho_{22} &= \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \text{sen}^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ &= 1, \end{aligned} \quad (81)$$

a diferença entre as populações

$$\begin{aligned} \rho_{11} - \rho_{22} &= \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - \text{sen}^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ &= \frac{1}{2}[(1 + \cos(\theta)) - (1 - \cos(\theta))] \\ &= \frac{1}{2}2\cos(\theta) \\ &= \cos(\theta), \end{aligned}$$

com o valor esperado de $spin$ da partícula orientado ao longo do eixo z dado por $\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2}\cos(\theta) \rightarrow \cos(\theta) = \frac{2}{\hbar}\langle S_z \rangle$, temos

$$\rho_{11} - \rho_{22} = \frac{2}{\hbar}\langle S_z \rangle, \quad (82)$$

a soma entre as "coerências"

$$\begin{aligned} \rho_{12} + \rho_{21} &= \frac{1}{2}e^{-i\phi}\text{sen}(\theta) + \frac{1}{2}e^{i\phi}\text{sen}(\theta) \\ &= \text{sen}(\theta) \left(\frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2} \right) \\ &= \cos(\phi)\text{sen}(\theta), \end{aligned}$$

com o valor esperado de $spin$ da partícula orientado ao longo do eixo x dado por $\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2}\text{sen}(\theta)\cos(\phi) \rightarrow \text{sen}(\theta)\cos(\phi) = \frac{2}{\hbar}\langle S_x \rangle$, temos

$$\rho_{12} + \rho_{21} = \frac{2}{\hbar}\langle S_x \rangle, \quad (83)$$

e diferença entre as "coerências"

$$\begin{aligned} i[\rho_{12} - \rho_{21}] &= i\text{sen}(\theta) \left(\frac{e^{i\phi} - e^{-i\phi}}{2} \right) \\ &= i^2\text{sen}(\theta)\text{sen}(\phi) \\ &= -\text{sen}(\theta)\text{sen}(\phi), \end{aligned}$$

com o valor esperado do *spin* da partícula orientado ao longo do eixo y dado por $\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin(\theta) \sin(\phi) \rightarrow \sin(\theta) \sin(\phi) = \frac{2}{\hbar} \langle S_y \rangle$, temos

$$i[\rho_{12} - \rho_{21}] = \frac{2}{\hbar} \langle S_y \rangle, \quad (84)$$

dessa forma os parâmetros de Stokes associados ficam

$$\begin{pmatrix} S_0 \\ S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{2}{\hbar} \langle S_x \rangle \\ \frac{2}{\hbar} \langle S_y \rangle \\ \frac{2}{\hbar} \langle S_z \rangle \end{pmatrix}, \quad (85)$$

cujos significados físicos são: S_0 e S_3 são representados pelos termos das "populações" e estão relacionados à polarização longitudinal (partícula polarizada horizontalmente e verticalmente). Já os parâmetros S_1 e S_2 , são representados pelos termos das "coerências" e estão relacionados com a polarização transversal (partícula polarizada à 45°).

Em resumo, na óptica clássica os parâmetros de Stokes definem o estado de polarização de um feixe de luz de acordo com a sua intensidade e em relação a uma das bases existentes (horizontal, vertical, diagonal, anti-diagonal, rotação à direita e rotação à esquerda), na ótica quântica eles se definem em termos das probabilidades de um dado fóton se apresentar em um dos estados de uma dessas bases, após a medida.

2.3 Algoritmo de *Machine Learning*

Machine Learning (traduzido significa Aprendizado de Máquina) é uma forma de Inteligência Artificial que permite um sistema aprender a partir de dados. Usa uma variedade de algoritmos que aprendem iterativamente com os dados para melhorar, descrever dados e prever resultados. Como algoritmos assimilam trem de dados, é então possível produzir modelos mais precisos baseados nesses dados. Quando fornece um modelo com uma entrada, será dado uma saída (HURWITZ; KIRSCH, 2018).

Um algoritmo de nosso interesse é o **Algoritmo de Regressão**⁹, usado para análises estatísticas e ajuda na modelação de relação entre os pontos de dados ou variáveis, prevendo assim os valores futuros com base nos dados de entrada. Em uma análise de regressão precisamos encontrar uma função que mapeia algumas variáveis para outras suficientemente bem. As funções dependentes são chamadas de **variáveis dependentes, saídas ou respostas** e funções independentes são chamadas de **variáveis independentes, entradas ou preditor** (STOJILJKOVIC, 2021).

Nessa seção veremos o conceito de regressão linear e regressão polinomial cuja implementação começa tipicamente com um par de conjunto de dados de entrada-saída ($x - y$).

⁹ Regressão significa aproximar uma função alvo de valor real para prever a resposta de um conjunto de dados. Análise de regressão é uma das importante campo de estatística e *machine learning*.

2.3.1 Regressão Linear

Regressão linear é um dos métodos estatístico mais simples de regressão que serve para modelar relações entre uma variável dependente com conjunto de dados de variáveis independentes. Assume uma relação linear entre a variável dependente y com a variável independente x na forma

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_i x_i + \epsilon_i, \quad (86)$$

conhecida como **equação de regressão**, onde $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_i$ são os coeficientes de regressão, ϵ_i é o erro aleatório ou residual e i é o número de preditores (ou observação). Usa-se o algoritmo de regressão linear com objetivo de encontrar uma função linear que prevê o valor da variável y_i tão preciso quanto uma variável x_i .

Por exemplo, suponha que um conjunto de pontos de x (pontos de entrada) e y (pontos de saída) se relacionam como mostrada em Fig. 4. Queremos achar uma linha que encaixe bem na resposta do gráfico 4(a) de modo que consigamos prever os resultados futuros dessa relação entre os pontos de x e y . A linha que encaixe bem nessa relação é a mostrada no gráfico 4(b) e é chamada de linha de regressão.

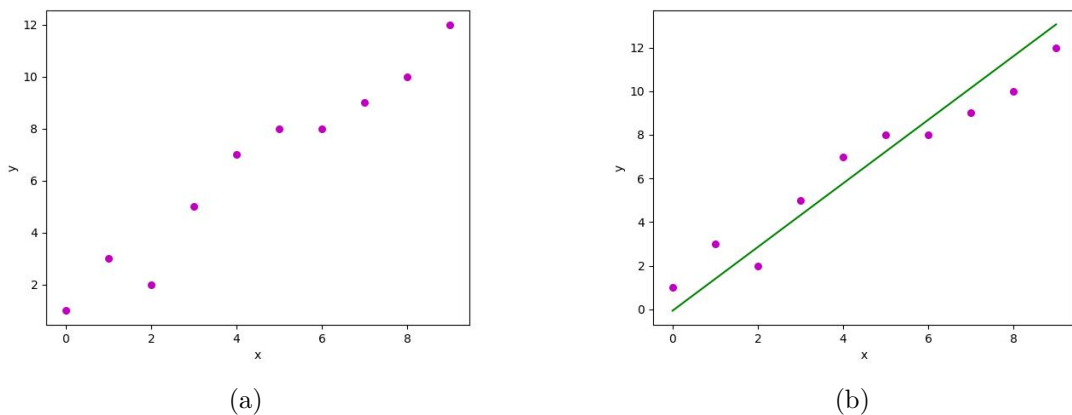


Figura 4 – Relação entre pontos de entrada x e a saída y . (GEEKSFORGEEEKS, 2022)

Regressão linear calcula os estimadores ou pesos previstos de valores dos coeficientes de regressão ($\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_i$) a partir da equação da **função de regressão estimada** (equação da linha de regressão) definida por

$$f(x_i) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_i x_i, \quad (87)$$

onde $f(x_i)$ representa os valores da resposta estimada ou prevista que, para cada observação $i = 1, \dots, n$, deve ser tão fechada quanto possível à resposta atual y_i . O coeficiente de regressão β_0 representa o ponto de intercepção da linha de regressão no eixo y e β_1 representa a inclinação de linha de regressão. Então para criar um modelo devemos aprender a calcular os valores dos coeficientes de regressão.

Substituindo a Eq. (87) em (86), temos

$$y_i = f(x_i) + \epsilon_i, \quad (88)$$

onde podemos ver que a diferença entre y_i e $f(x_i)$ define o **erro residual**¹⁰ ϵ_i , isto é,

$$\epsilon_i = y_i - f(x_i). \quad (89)$$

Para minimizar o erro residual total, utiliza-se o método de mínimos quadrados ordinários cuja a função, que denotaremos por E , é dada por

$$E = \sum_i (y_i - f(\bar{x}_i))^2. \quad (90)$$

O exemplo da Fig. 5 mostra o resultado da implementação de regressão linear para os pares de pontos de entrada x e saída y . Nela, os pontos de círculos verdes denotam aos pares de observação correspondentes a respostas atual que são calculados a partir da Eq. (86). Os pontos de quadrados vermelhos sobre a linha preta (linha de regressão estimada pela função $f(x)$) denotam os pontos de respostas previstas calculadas a partir da função $f(x_i)$ da Eq. (87), com b_0 e b_1 igual a β_0 e β_1 , respectivamente. Os coeficientes b_0 e b_1 que minimizam e determinam a função regressão estimada na figura são calculados a partir da Eq. (90). Já as linhas cinzas tracejadas, que são as distâncias entre os círculos verdes e quadrados vermelhos, representam os erros residuais calculadas a partir da Eq. (89)¹¹.

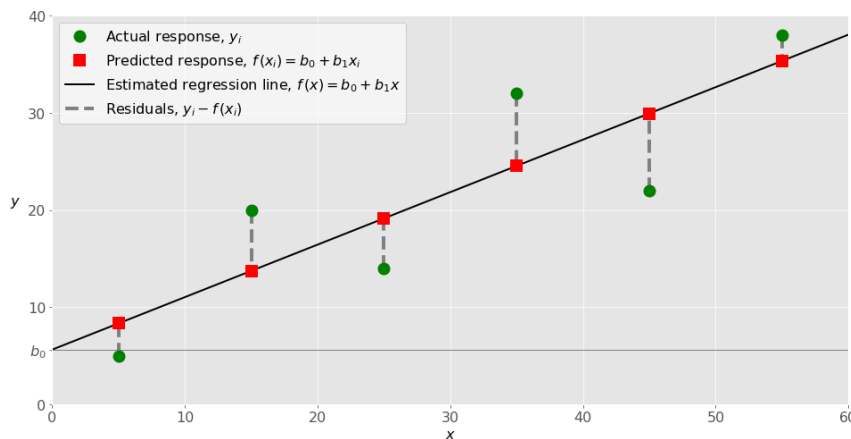


Figura 5 – Gráfico de regressão linear que mostra os pontos de resposta atual (círculos verdes), os pontos de resposta prevista (quadrados vermelhos) e o erro residual (linhas tracejadas). (STOJILJKOVIC, 2021)

¹⁰ Regressão é sobre determinar os melhores pesos previstos, isto é, os pesos correspondentes ao menor erro residual. (STOJILJKOVIC, 2021)

¹¹ Quando implementa regressão linear, está na verdade tentando minimizar essas distâncias e fazendo os quadros vermelhos tão próximos quanto possível aos círculos verdes. (STOJILJKOVIC, 2021)

2.3.2 Regressão Polinomial

Regressão polinomial é um caso geral da regressão linear em que a relação entre a variável dependente y (saída) e variável independente x (entrada) é dada por

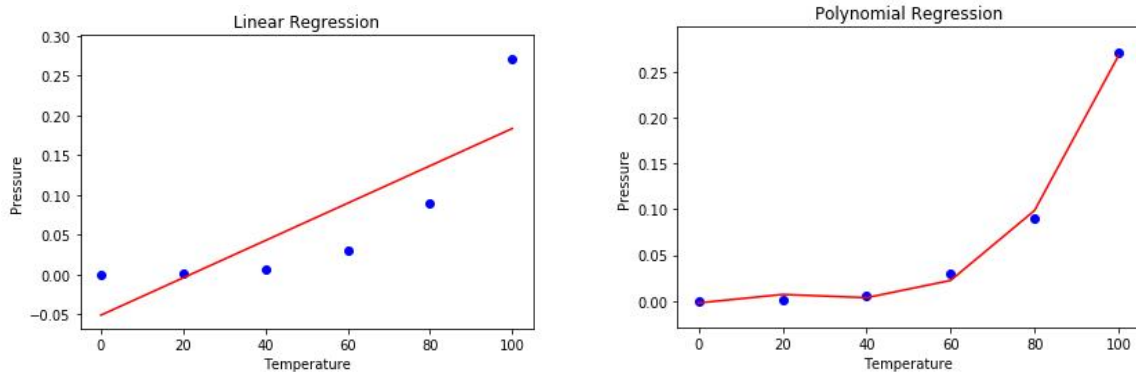
$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2^2 + \dots + \beta_i x_i^n + \epsilon_i, \quad (91)$$

isto é, a relação é modelada pelo n -ésimo grau polinomial, incluindo termos como $\beta_3 x_1^3$, $\beta_4 x_1 x_2$, $\beta_5 x_1^2 x_2$. A mais simples das funções polinomiais é função de grau 2. A função de regressão polinomial é dada por

$$f(x_i) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2^2 + \dots + \beta_i x_i^n, \quad (92)$$

em que, tal como em regressão linear, a ideia aqui é calcular também os coeficientes de regressão $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_i$ para minimizar o quadrado do erro residual E .

A escolha de regressão polinomial em detrimento de regressão linear está na natureza do problema que queremos resolver. Os problemas curvilíneos é um ótimo exemplo. Tentar encaixar a regressão linear para esses casos não é apropriado uma vez que a linha de regressão não pega grande parte dos pontos espalhados, isto é, o erro residual é muito grande. A Fig. 6 mostra o exemplo da implementação de regressão em um gráfico que mostra como a pressão cresce de forma curvilínea em função de temperatura. Podemos ver que o encaixe da linha de regressão implementado no gráfico 6(b) é muito melhor que o encaixe linear do gráfico 6(a).



(a) Implementação de regressão linear sobre os pontos curvilíneos.

(b) Implementação de regressão polinomial sobre os pontos curvilíneos.

Figura 6 – Implementação de regressão linear e regressão polinomial na relação entre pontos de entrada (temperatura) e pontos de saída (pressão). (GEEKSFORGE-EKS, 2022)

O encaixe da linha de regressão é determinado pelo **coeficiente de determinação**, R^2 . O R^2 nos diz sobre a eficiência do modelo, mostrando o quanto os valores da saída flutuam em torno da linha de regressão. R^2 varia de 0 à 1 com $R^2 = 0$ (correspondendo $E = 1$) indicando mau encaixe (sem relacionamento entre os pontos) e $R^2 = 1$ (correspondendo $E = 0$) indicando um encaixe perfeito (os pontos se relacionam 100%). A Fig.

7 mostra como o encaixe varia com aumento do grau do polinômio¹². Nela podemos ver que para o polinômio de grau 1 (caso linear) o R^2 é quase zero ($R^2 = 0.09$), já para o polinômio de grau 5 o encaixe é perfeito ($R^2 = 1$).

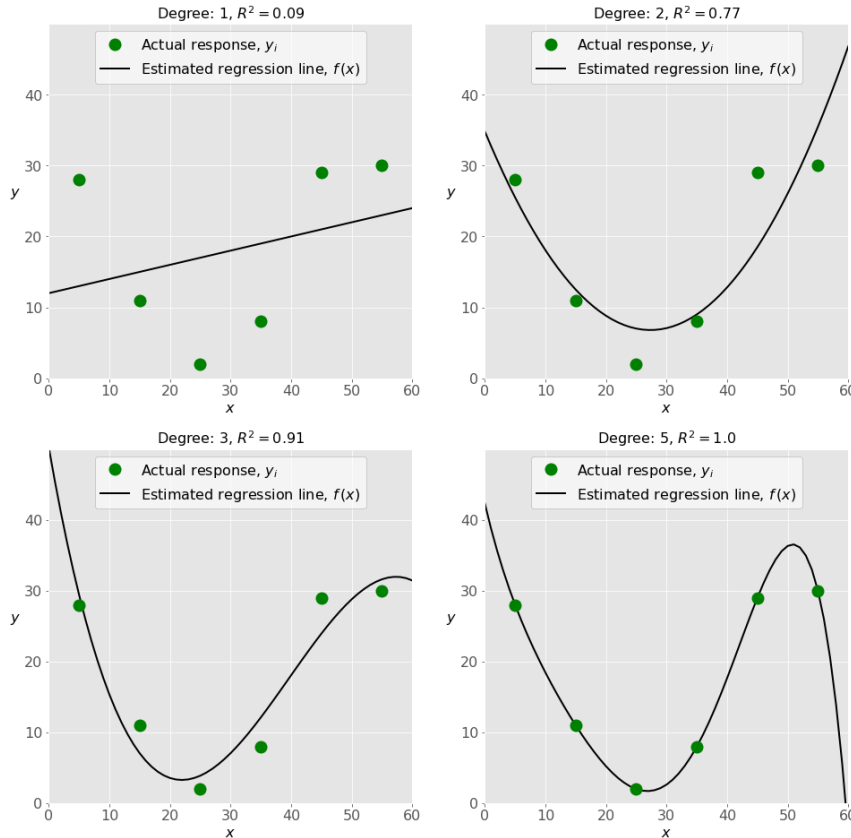


Figura 7 – Implementação de regressão polinomial de grau 1, 2, 3 e 5 (STOJILJKOVIC, 2021).

2.4 Python: Qutip

Python é uma linguagem de computador interpretada, altamente eficiente, deixando o trabalho mais rápido. É das linguagens mais usadas hoje em dia em todo mundo (PYTHON, 2022). Faz uso das bibliotecas que reúnem várias ferramentas (matemáticas ou físicas) que auxiliam durante seu uso. Dentre essas bibliotecas se destacam *qutip*, *numpy*, *matplotlib* e *pandas*.

Qutip é uma biblioteca que reúne várias ferramentas quânticas. É muito usada pelos físicos servindo do laboratório experimental para várias simulações de sistemas quânticos como simulações numéricas de uma vasta variedade de Hamiltonianos, incluindo aqueles com dependência temporal arbitrária, comumente encontrado em uma vasta intervalo de

¹² Não existe uma regra para escolha de grau de polinômio, depende do problema que está sendo trabalhado. O importante é escolher o grau de polinômio que encaixe perfeito para seu modelo.

aplicações físicas tais como ópticas quânticas, armadilhas de íons, circuitos de supercondutores e ressonâncias nanomecânicas quântico (QUTIP, 2022). Dentro dessa biblioteca encontra-se o módulo *mesolve* que fornece a solução para equação mestra de Lindblad e equação de von-Neumann.

Numpy é das bibliotecas científicas mais importante, fazendo uso de criação e manipulação dos objetos matemáticos. Fornece objetos de matrizes, lógicas, sorteios, seleção, álgebra linear básica, operações estatísticas, simulações aleatórios (NUMPY, 2022). *Matplotlib* é a biblioteca usada para uso de construção de manipulações dos gráficos, fornecendo visualização e animação dos mesmo (MATPLOTLIB, 2022). *Pandas* é a biblioteca usada para manipulação e análise dos dados de forma rápida, poderosa e flexível (PANDAS, 2022).

As outras bibliotecas úteis que usaremos para criação do nosso modelo experimental são: *Scipy*, fornece algoritmos para otimização, integração, interpolação, problemas dos autovalores, equações algébricas, equações diferenciais (SCIPY, 2022). *Scikit-learn* é uma biblioteca de *machine learning* que fornece várias ferramentas para modelos de encaixe, processando dados, avaliação do modelo (LEARN, 2022).

Modelo teórico

Nesse capítulo descreveremos a proposta do nosso modelo teórico para reconstrução da matriz densidade de um único *qubit* de *spin* do elétron usando transporte quântico *spin* polarizado. Aplicaremos a técnica de *qubit* fotônico para investigar o processo de tunelamento de *spin* polarizado que fornece distribuição de probabilidade em diferentes eixos de quantização de *spin*.

3.1 Visão Geral do modelo teórico

O nosso modelo propõe reconstruir a matriz densidade usando a relação da Eq. (74). Para isso, simulamos a detecção dos eventos de tunelamento com orientação dos *spins* ao longo das direções x_{\pm} , y_{\pm} e z_{\pm} , e calculamos as probabilidades de cada evento. Uma vez obtidas as probabilidades, usamos as suas relações com os parâmetros de Stokes, para relaciona-las com os elementos da matriz densidade, e reconstruir assim a matriz densidade.

Sendo um sistema aberto, utilizamos a equação mestra de Lindblad para simular a dinâmica do sistema, e com isso gerar os eventos de tunelamento. Na próxima seção faremos a descrição teórica e matemática detalhada do nosso modelo, aplicaremos a equação de Lindblad, construiremos a distribuições de probabilidade que serão a base dos eventos de tunelamento, calcularemos os parâmetros de Stokes, e por fim, mostraremos as relações com as quais reconstruímos a matriz densidade.

3.2 Formalismo matemático

3.2.1 Descrição do sistema quântico aberto

No nosso modelo teórico, consideramos um sistema aberto constituído por um nanodispositivo ligado a reservatórios ferromagnético totalmente polarizados com suas magnetizações ao longo de alguma direção específica dada por $\lambda s = x_{\pm}, y_{\pm}, z_{\pm}$. A Fig. 8 é a

ilustração desse sistema. Na parte direita da figura temos a fonte da polarização de *spin*, que é reservatório ferromagnético, ligado a uma bateria. Vamos supor que o estado inicial do *spin* do elétron na fonte é $|z+\rangle$. A partir da fonte, o elétron é injetado eletricamente em um ponto quântico, e esse processo de interação entre um objeto clássico (fonte) e objeto quântico (ponto quântico) ocorre mediante um valor constante Γ_0 que é o parâmetro de relaxamento. O elétron passa por ponto quântico antes de ser detectado pelo detector a esquerda da figura medindo assim o estado quântico do sistema.

Esse esquema representa o sistema com reservatórios ferromagnéticos dispostos ao longo da direção $z\pm$. Podemos perfeitamente modificar o sistema colocando a orientação dos reservatórios ferromagnéticos ao longo das direções $x\pm$ e $y\pm$. O campo magnético \vec{B} é na direção do eixo x .

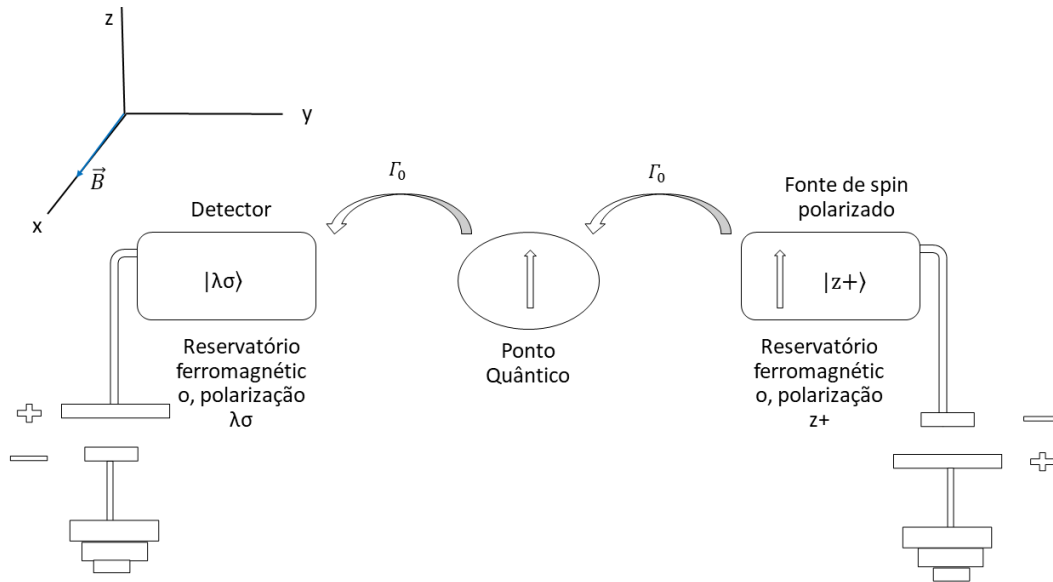


Figura 8 – Sistema Quântico aberto composto por ponto quântico e reservatório ferromagnético com campo magnético na direção x . Γ_0 , parâmetro de relaxamento; $|z+\rangle$, *spin* para cima na direção $z+$; λ , eixo de orientação de magnetização; σ , *spin* do elétron; \vec{B} , campo magnético.

3.2.2 O Hamiltoniano do sistema

O Hamiltoniano total que define o sistema é dado por

$$H = H_0 + H_T^{\lambda s}, \quad (93)$$

onde $H_T^{\lambda s}$ é o Hamiltoniano do tunelamento devido ao acoplamento entre ponto quântico e reservatório ferromagnético, que será dado por

$$H_T^{\lambda s} = V \sum_k C_{k, \lambda s}^\dagger d_{\lambda s}, \quad (94)$$

em que V é o parâmetro de tunelamento entre o ponto quântico e reservatório, $C_{k,\lambda s}^\dagger$ é o operador que cria um elétron com vetor de onda k e $d_{\lambda s}$ é o operador que aniquila um elétron no ponto quântico com spin λs . H_0 é o Hamiltoniano do ponto quântico que definimos por

$$H_0 = \frac{\Omega}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \hat{n} \cdot \vec{\sigma}_{\sigma\sigma'} d_\sigma^\dagger d_{\sigma'}, \quad (95)$$

em que \hat{n} especifica a direção de campo magnético, Ω é a constante característica, proporcional a intensidade do campo magnético, $\sigma = \uparrow, \downarrow$ define a orientação do spin ao longo do eixo z (por vezes usaremos $\uparrow = z+$ e $\downarrow = z-$ para caracterizar a orientação dos *spins* ao longo da direção z), $\sigma_{\sigma\sigma'}$ são operadores de Pauli com orientação de spin e $d_\sigma^\dagger (d_{\sigma'})$ são operadores de criação (aniquilação). Em termo de representação Jordan-Wigner, os operadores de criação e aniquilação serão dados por ¹

$$d_\uparrow = \sigma_- \otimes I, \quad d_\uparrow^\dagger = \sigma_+ \otimes I, \quad d_\downarrow = -\sigma_z \otimes \sigma_-, \quad d_\downarrow^\dagger = -\sigma_z \otimes \sigma_+, \quad (96)$$

com

$$\sigma_+ = \frac{1}{2} (\sigma_x + i\sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_- = \frac{1}{2} (\sigma_x - i\sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (97)$$

Esta representação satisfaz a relação de autocomutação $\{d_\sigma, d_{\sigma'}\} = 0$ e $\{d_\sigma, d_{\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\sigma\sigma'}$. Ao longo da direção x e y , os operadores de aniquilação serão dados por

$$d_{x+} = \frac{1}{\sqrt{2}} (d_\uparrow + d_\downarrow), \quad d_{x-} = \frac{1}{\sqrt{2}} (d_\uparrow - d_\downarrow), \quad d_{y+} = \frac{1}{\sqrt{2}} (d_\uparrow + id_\downarrow), \quad d_{y-} = \frac{1}{\sqrt{2}} (d_\uparrow - id_\downarrow), \quad (98)$$

com respectivos operadores de criação.

Reescrevendo o Hamiltoniano do ponto quântico como

$$H_0 = \frac{\Omega}{2} \left(e^{-i\theta_B} \cdot d_\uparrow^\dagger \cdot d_\downarrow + e^{i\theta_B} \cdot d_\downarrow^\dagger \cdot d_\uparrow \right), \quad (99)$$

lembrando que $e^{i\theta_B} = \cos(\theta_B) + i\text{sen}(\theta_B)$ e $e^{-i\theta_B} = \cos(\theta_B) - i\text{sen}(\theta_B)$ onde θ_B é o ângulo entre campo magnético e eixo x ao longo de plano xy . Em termo da representação matricial temos

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{\Omega}{2} \left[e^{-i\theta_B} (\sigma_+ \otimes I) (-\sigma_z \otimes \sigma_-) + e^{i\theta_B} (-\sigma_z \otimes \sigma_+) (\sigma_- \otimes I) \right] \\ &= -\frac{\Omega}{2} \left[e^{-i\theta_B} (\sigma_+ \sigma_z \otimes I \sigma_-) + e^{i\theta_B} (\sigma_z \sigma_- \otimes \sigma_+ I) \right] \\ &= -\frac{\Omega}{2} e^{-i\theta_B} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &\quad - \frac{\Omega}{2} e^{i\theta_B} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

¹ Pela definição dos operadores da Eq. (96) a dimensão do nosso espaço é 4x4.

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\Omega}{2} \left[e^{-i\theta_B} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + e^{i\theta_B} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \\
&= \frac{\Omega}{2} \left[e^{-i\theta_B} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + e^{i\theta_B} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right]. \tag{100}
\end{aligned}$$

Em caso particular onde $\theta_B = 0$, isto é, com campo magnético ao longo de direção x , a Eq. (99) fica:

$$H_0 = \frac{\Omega}{2} (\sigma_{\uparrow\uparrow}^x d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + \sigma_{\uparrow\downarrow}^x d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + \sigma_{\downarrow\uparrow}^x d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + \sigma_{\downarrow\downarrow}^x d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow}), \tag{101}$$

como podemos ver pelo operador de Pauli ao longo de direção x

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{\uparrow\uparrow}^x & \sigma_{\uparrow\downarrow}^x \\ \sigma_{\downarrow\uparrow}^x & \sigma_{\downarrow\downarrow}^x \end{pmatrix}, \tag{102}$$

de modo que $\sigma_{\uparrow\uparrow}^x = \sigma_{\downarrow\downarrow}^x = 0$, $\sigma_{\uparrow\downarrow}^x = \sigma_{\downarrow\uparrow}^x = 1$, então

$$H_0 = \frac{\Omega}{2} (d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow}), \tag{103}$$

que em termo matricial fica:

$$\begin{aligned}
H_0 &= \frac{\Omega}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \\
&= \frac{\Omega}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{104}
\end{aligned}$$

3.2.3 As bases do sistema

A partir do estado de um *qubit* definido no conjunto da base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, com

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{105}$$

definimos uma das bases do sistema como

$$\begin{aligned}
|00\rangle &= |0\rangle \otimes |0\rangle \\
&= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{106}
\end{aligned}$$

analogamente,

$$|01\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |11\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (107)$$

que corresponde a base computacional do sistema.

Pela equação da matriz densidade reduzida, tomando o traço sobre os graus de liberdade do reservatório ferromagnéticos, temos

$$\rho(t) = \text{Tr}_R \{ \rho_{tot}(t) \}, \quad (108)$$

assim, a matriz densidade do sistema reduzido, que descreve o *ensemble* de *qubits*, é dada por

$$\rho = \sum_{i,j,l,m=0}^1 \rho_{ij,lm} |ij\rangle \langle lm|, \quad (109)$$

escrito a partir das bases do sistema ficam

$$\rho = \rho_{00,00} |00\rangle \langle 00| + \rho_{01,01} |01\rangle \langle 01| + \rho_{10,10} |10\rangle \langle 10| + \rho_{11,11} |11\rangle \langle 11|, \quad (110)$$

cujo o número de ocupação de elétron com *spin* para cima, n_\uparrow , ao longo da direção z é dado por

$$\begin{aligned} n_\uparrow &= d_\uparrow^\dagger d_\uparrow \\ &= (\sigma_+ \otimes I)(\sigma_- \otimes I) \\ &= \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (111)$$

e o número de ocupação de elétron com *spin* para baixo, n_\downarrow , ao longo da direção z é dado por

$$\begin{aligned} n_\downarrow &= d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \\ &= (-\sigma_z \otimes \sigma_+)(-\sigma_z \otimes \sigma_-) \\ &= \left[- \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \left[- \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (112)$$

assim, fazendo a soma dos dois temos que o número total de ocupação dos elétrons com *spin* para cima e elétrons com *spin* para baixo ao longo da direção z no sistema reduzido é dado por

$$\begin{aligned}
 n_{total}^z &= n_{\uparrow} + n_{\downarrow} \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{113}
 \end{aligned}$$

o que mostra que o primeiro estado do sistema reduzido é duplamente ocupado com elétron de *spin* para cima e o outro de *spin* para baixo, já o segundo e o terceiro são ocupados por um único elétron com *spin* para cima e com *spin* para baixo, respectivamente, por fim, o último estado não é preenchido por qualquer elétron o que determinamos por estado de vácuo. Podemos reescrever as bases do sistema reduzido em termo da notação dos *spins* como

$$|00\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle, |01\rangle = |\uparrow\rangle, |10\rangle = |\downarrow\rangle, |11\rangle = |vacuo\rangle, \tag{114}$$

e reescrever também o operador densidade do sistema reduzido (Eq. (115)) como

$$\rho = \rho_{00,00} |\uparrow\downarrow\rangle \langle\uparrow\downarrow| + \rho_{01,01} |\uparrow\rangle \langle\uparrow| + \rho_{10,10} |\downarrow\rangle \langle\downarrow| + \rho_{11,11} |vacuo\rangle \langle vacuo|, \tag{115}$$

onde $\rho_{00,00}$ dá a probabilidade da dupla ocupação do elétron no sistema, $\rho_{01,01}$ e $\rho_{10,10}$ fornecem as probabilidades de ocupação de um único elétron com *spin* para cima e com *spin* para baixo, respectivamente, e $\rho_{11,11}$ fornece a probabilidade de zero ocupação de elétron.

Pela Eq. (98) podemos mostrar que os números de ocupações ao longo da direção x e y são dados por: em x

$$\begin{aligned}
 n_{x+} &= d_{x+}^{\dagger} d_{x+} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (d_{\uparrow}^{\dagger} + d_{\downarrow}^{\dagger}) \frac{1}{\sqrt{2}} (d_{\uparrow} - d_{\downarrow}) \\
 &= \frac{1}{2} \{[(\sigma_{+} \otimes I) + (-\sigma_z \otimes \sigma_{+})][(\sigma_{-} \otimes I) - (-\sigma_z \otimes \sigma_{-})]\} \\
 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{116}
 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
n_{x-} &= d_{x-}^\dagger d_{x-} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} (d_\uparrow^\dagger + d_\downarrow^\dagger) \frac{1}{\sqrt{2}} (d_\uparrow - d_\downarrow) \\
&= \frac{1}{2} \{[(\sigma_+ \otimes I) - (-\sigma_z \otimes \sigma_+)] [(\sigma_- \otimes I) - (-\sigma_z \otimes \sigma_-)]\} \\
&= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{117}
\end{aligned}$$

a soma total em direção x é

$$\begin{aligned}
n_{total}^x &= n_{x+} + n_{x-} \tag{118} \\
&= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{119}
\end{aligned}$$

em y

$$\begin{aligned}
n_{y+} &= d_{y+}^\dagger d_{y+} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} (d_\uparrow^\dagger - id_\downarrow^\dagger) \frac{1}{\sqrt{2}} (d_\uparrow + id_\downarrow) \\
&= \frac{1}{2} \{[(\sigma_+ \otimes I) - i(-\sigma_z \otimes \sigma_+)] [(\sigma_- \otimes I) + i(-\sigma_z \otimes \sigma_-)]\} \\
&= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1i & -1i & 0 \\ 0 & 1i & 1i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{120}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
n_{y-} &= d_{y-}^\dagger d_{y-} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} (d_\uparrow^\dagger + id_\downarrow^\dagger) \frac{1}{\sqrt{2}} (d_\uparrow - id_\downarrow) \\
&= \frac{1}{2} \{[(\sigma_+ \otimes I) + i(-\sigma_z \otimes \sigma_+)] [(\sigma_- \otimes I) - i(-\sigma_z \otimes \sigma_-)]\} \\
&= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1i & 1i & 0 \\ 0 & -1i & 1i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{121}
\end{aligned}$$

a soma total em direção y é

$$n_{total}^y = n_{y+} + n_{y-} \quad (122)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1i & -1i & 0 \\ 0 & 1i & 1i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1i & 1i & 0 \\ 0 & -1i & 1i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (123)$$

assim, verificamos também que a soma total do número de ocupação ao longo da direção x e y é igual a Eq. (113).

A magnetização ao longo da direção z é dada por

$$\begin{aligned} M_z &= n_{\uparrow} - n_{\downarrow} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (124)$$

em direção x é dada por

$$\begin{aligned} M_x &= n_{x+} - n_{x-} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (125)$$

em direção y é dada por

$$M_y = n_{y+} - n_{y-}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1i & -1i & 0 \\ 0 & 1i & 1i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1i & 1i & 0 \\ 0 & -1i & 1i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{126}$$

3.2.4 Dinâmica quântica do sistema

Para calcular a dinâmica quântica do sistema usamos a equação mestra de Lindblad, Eq. (297) (ver apêndice A), como

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\rho &= -i[H_0, \rho] + \mathcal{L}_{\lambda_s}\rho \\
&= -i[H_0, \rho] + \left[L_{\lambda_s}\rho L_{\lambda_s}^\dagger - \frac{1}{2} \{ L_{\lambda_s}^\dagger L_{\lambda_s}, \rho \} \right] \\
&= -i[H_0, \rho] + L_{\lambda_s}\rho L_{\lambda_s}^\dagger - \frac{1}{2} L_{\lambda_s}^\dagger L_{\lambda_s}\rho - \frac{1}{2} \rho L_{\lambda_s}^\dagger L_{\lambda_s},
\end{aligned} \tag{127}$$

onde

$$\mathcal{L}_{\lambda_s}\rho = L_{\lambda_s}\rho L_{\lambda_s}^\dagger - \frac{1}{2} L_{\lambda_s}^\dagger L_{\lambda_s}\rho - \frac{1}{2} \rho L_{\lambda_s}^\dagger L_{\lambda_s} \tag{128}$$

com \mathcal{L}_{λ_s} , o superoperador, representando o processo de tunelamento do sistema, e L_{λ_s} são operadores de colapso, responsáveis pelo dreno de elétron no ponto quântico. Definimos os operadores de colapso ao longo de cada direção $x\pm$, $y\pm$ e $z\pm$ como: em direção $x\pm$

$$\begin{aligned}
L_{x+} &= \sqrt{\frac{2\pi\Gamma_0}{\Omega}} d_{x+} \\
L_{x-} &= \sqrt{\frac{2\pi\Gamma_0}{\Omega}} d_{x-},
\end{aligned} \tag{129}$$

em direção $y\pm$

$$\begin{aligned}
L_{y+} &= \sqrt{\frac{2\pi\Gamma_0}{\Omega}} d_{y+} \\
L_{y-} &= \sqrt{\frac{2\pi\Gamma_0}{\Omega}} d_{y-},
\end{aligned} \tag{130}$$

e em direção $z\pm$

$$\begin{aligned}
L_{z+} &= \sqrt{\frac{2\pi\Gamma_0}{\Omega}} d_\uparrow \\
L_{z-} &= \sqrt{\frac{2\pi\Gamma_0}{\Omega}} d_\downarrow,
\end{aligned} \tag{131}$$

com respectivos operadores de criação, onde Γ_0 é o parâmetro de tunelamento. Substituindo as Eqs. (129)-(131) em (127) temos as seguintes equações que governam a dinâmica do sistema de acordo com a orientação dos *spins* ao longo de direção $x\pm$, $y\pm$ e $z\pm$ dadas por: em direção $z+$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\rho_{z+} &= -i[H_0, \rho] + L_{z+}\rho L_{z+}^\dagger - \frac{1}{2} (L_{z+}^\dagger L_{z+}\rho + \rho L_{z+}^\dagger L_{z+}) \\
&= -i[H_0, \rho] + \frac{4\pi^2\Gamma_0^2}{\Omega^2} d_\uparrow \rho d_\uparrow^\dagger - \frac{2\pi^2\Gamma_0^2}{\Omega^2} (d_\uparrow^\dagger d_\uparrow \rho + \rho d_\uparrow^\dagger d_\uparrow) \\
&= -i[H_0, \rho] + \frac{4\pi^2\Gamma_0^2}{\Omega^2} d_\uparrow \rho d_\uparrow^\dagger - \frac{2\pi^2\Gamma_0^2}{\Omega^2} (n_\uparrow \rho + \rho n_\uparrow)
\end{aligned} \tag{132}$$

em direção $x+$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\rho_{x+} &= -i[H_0, \rho] + L_{x+}\rho L_{x+}^\dagger - \frac{1}{2}\left(L_{x+}^\dagger L_{x+}\rho + \rho L_{x+}^\dagger L_{x+}\right) \\
&= -i[H_0, \rho] + \frac{4\pi^2\Gamma_0^2}{\Omega^2}d_{x+}\rho d_{x+}^\dagger - \frac{2\pi^2\Gamma_0^2}{\Omega^2}\left(d_{x+}^\dagger d_{x+}\rho + \rho d_{x+}^\dagger d_{x+}\right) \\
&= -i[H_0, \rho] + \frac{4\pi^2\Gamma_0^2}{\Omega^2}d_{x+}\rho d_{x+}^\dagger - \frac{2\pi^2\Gamma_0^2}{\Omega^2}(n_{x+}\rho + \rho n_{x+}), \tag{133}
\end{aligned}$$

em direção $y+$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\rho_{y+} &= -i[H_0, \rho] + L_{y+}\rho L_{y+}^\dagger - \frac{1}{2}\left(L_{y+}^\dagger L_{y+}\rho + \rho L_{y+}^\dagger L_{y+}\right) \\
&= -i[H_0, \rho] + \frac{4\pi^2\Gamma_0^2}{\Omega^2}d_{y+}\rho d_{y+}^\dagger - \frac{2\pi^2\Gamma_0^2}{\Omega^2}\left(d_{y+}^\dagger d_{y+}\rho + \rho d_{y+}^\dagger d_{y+}\right) \\
&= -i[H_0, \rho] + \frac{4\pi^2\Gamma_0^2}{\Omega^2}d_{y+}\rho d_{y+}^\dagger - \frac{2\pi^2\Gamma_0^2}{\Omega^2}(n_{y+}\rho + \rho n_{y+}), \tag{134}
\end{aligned}$$

analogamente, temos: em direção $z-$

$$\frac{d}{dt}\rho_{z-} = -i[H_0, \rho] + \frac{4\pi^2\Gamma_0^2}{\Omega^2}d_{\downarrow}\rho d_{\downarrow}^\dagger - \frac{2\pi^2\Gamma_0^2}{\Omega^2}(n_{\downarrow}\rho + \rho n_{\downarrow}), \tag{135}$$

em direção $x-$

$$\frac{d}{dt}\rho_{x-} = -i[H_0, \rho] + \frac{4\pi^2\Gamma_0^2}{\Omega^2}d_{x-}\rho d_{x-}^\dagger - \frac{2\pi^2\Gamma_0^2}{\Omega^2}(n_{x-}\rho + \rho n_{x-}), \tag{136}$$

em direção $y-$

$$\frac{d}{dt}\rho_{y-} = -i[H_0, \rho] + \frac{4\pi^2\Gamma_0^2}{\Omega^2}d_{y-}\rho d_{y-}^\dagger - \frac{2\pi^2\Gamma_0^2}{\Omega^2}(n_{y-}\rho + \rho n_{y-}), \tag{137}$$

o nosso modelo permite uma dinâmica de corrente de *spin* no ponto quântico, que será investigada pelo evento de tunelamento.

Como ponto de partida para cálculo da dinâmica quântica do sistema, vamos assumir que a base do estado de inicialização será aquele em que há apenas um único elétron no ponto quântico, e subsequentemente drenado em reservatório ferromagnéticos, isto é, a carga flui em uma única direção de ponto quântico ao reservatório ferromagnéticos. Essa escolha de inicialização nos permite excluir a dupla ocupação no estado $|00\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle$ do sistema². Vamos escolher a base

$$|01\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{138}$$

cuja matriz densidade reduzida inicial é

$$\begin{aligned}
\rho &= \rho_{01,01} |01\rangle \langle 01| \\
&= \rho_{01,01} |\uparrow\rangle \langle \uparrow|, \tag{139}
\end{aligned}$$

como sendo a base de estado de inicialização.

² De modo a evitar repulsão colombiana que aparece no estado da dupla ocupação.

3.2.5 As probabilidades e os parâmetros de Stokes

A probabilidade para que um evento de tunelamento ocorra no sistema em tempo t_i é dada por

$$P_{\lambda s}(t_i) = \Gamma_0 \int_{t_i - \frac{\delta}{2}}^{t_i + \frac{\delta}{2}} \langle \lambda s | \rho(t_i + \tau) | \lambda s \rangle d\tau, \quad (140)$$

onde δ é um intervalo de tempo muito pequeno. Para $\delta \approx 0$, a expressão da probabilidade se aproxima a

$$P_{\lambda s}(t_i) = \delta \Gamma_0 \langle \lambda s | \rho(t_i) | \lambda s \rangle, \quad (141)$$

assim, em cada direção $x+$, $y+$ e $z+$ temos as

$$P_{x+} = \delta \Gamma_0 \langle x+ | \rho | x+ \rangle, \quad (142)$$

$$P_{y+} = \delta \Gamma_0 \langle y+ | \rho | y+ \rangle \quad (143)$$

e

$$P_{z+} = \delta \Gamma_0 \langle + | \rho | + \rangle, \quad (144)$$

onde usamos $|\uparrow\rangle = |+\rangle$ e $|\downarrow\rangle = |-\rangle$. Lembrando que

$$|x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle) \quad (145)$$

e

$$|y+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + i|-\rangle), \quad (146)$$

podemos expressar toda a probabilidade na base de z como

$$\begin{aligned} P_{x+} &= \delta \Gamma_0 \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (\langle + | + \langle - |) |\rho| \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle) \right] \\ &= \frac{\delta \Gamma_0}{2} [\langle + | \rho | + \rangle + \langle + | \rho | - \rangle + \langle - | \rho | + \rangle + \langle - | \rho | - \rangle] \end{aligned} \quad (147)$$

e

$$\begin{aligned} P_{y+} &= \delta \Gamma_0 \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (\langle + | - i \langle - |) |\rho| \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + i|-\rangle) \right] \\ &= \frac{\delta \Gamma_0}{2} [\langle + | \rho | + \rangle + i \langle + | \rho | - \rangle - i \langle - | \rho | + \rangle + \langle - | \rho | - \rangle]. \end{aligned} \quad (148)$$

Com as probabilidades de eventos de tunelamento definidas, seguindo o modelo das Eqs. (60) - (63), podemos relacioná-las com os parâmetros de Stokes para uma orientação específica de *spin* dada por

$$S_0 = \frac{2}{\delta \Gamma_0} P_0, \quad (149)$$

$$S_1 = \frac{2}{\delta\Gamma_0} (P_{x+} - P_0), \quad (150)$$

$$S_2 = \frac{2}{\delta\Gamma_0} (P_{y+} - P_0) \quad (151)$$

e

$$S_3 = \frac{2}{\delta\Gamma_0} (P_{z+} - P_0), \quad (152)$$

onde

$$P_0 = \frac{1}{2} (P_{z+} + P_{z-}), \quad (153)$$

os parâmetros de Stokes se definem em termo das probabilidades de um dado elétron se apresentar em um dos estados após a medida.

3.2.6 Reconstrução dos elementos da matriz densidade

Seja matriz densidade do sistema dada por

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix}, \quad (154)$$

cuja relação com os parâmetros de Stokes dada pela Eq. (64), podemos reconstruir os elementos da matriz densidade do sistema usando as relações das Eqs. (75) - (78).

Fazendo a soma da Eq. (75) com a (78) podemos mostra que os elementos da diagonal (populações) são dados da seguinte forma:

$$S_0 + S_3 = \rho_{11} + \rho_{22} + \rho_{11} - \rho_{22}, \quad (155)$$

daí podemos ver que

$$\rho_{11} = \frac{1}{2} (S_0 + S_3), \quad (156)$$

substituindo Eq. (156) em (75) temos

$$S_0 = \frac{1}{2} S_0 + \frac{1}{2} S_3 + \rho_{22} \quad (157)$$

daí podemos ver que

$$\begin{aligned} \rho_{22} &= S_0 - \frac{1}{2} S_0 - \frac{1}{2} S_3 \\ &= \frac{1}{2} (S_0 - S_3). \end{aligned} \quad (158)$$

Somando a Eq. (76) com (78) podemos mostrar que os elementos fora da diagonal (coerência) são dados da seguinte forma:

$$S_1 + iS_2 = \rho_{21} + \rho_{12} + \rho_{21} - \rho_{12}, \quad (159)$$

daí podemos ver que

$$\rho_{21} = \frac{1}{2}(S_1 + iS_2), \quad (160)$$

substituindo a Eq. (160) em (76) temos

$$S_1 = \frac{1}{2}S_1 + \frac{1}{2}iS_2 + \rho_{12}, \quad (161)$$

daí podemos ver que

$$\rho_{12} = \frac{1}{2}(S_1 - iS_2), \quad (162)$$

o que mostra que os elementos fora da diagonal contêm a parte real e a parte imaginária, como como vimos em 2.1.2. A matriz densidade de um *qubit* do sistema fica

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} S_0 + S_3 & S_1 - iS_2 \\ S_1 + iS_2 & S_0 - S_3 \end{pmatrix}, \quad (163)$$

que é o operador densidade de estado de um *qubit*, como vimos em seção 2.1.3, que escrevemos em termo dos parâmetros de Stokes. $Tr\rho = 1$, $\rho = \rho^\dagger$ e $\rho \geq 0^3$.

Usando as Eqs. (149) e (152), podemos escrever os elementos da diagonal da matriz densidade através das probabilidades como:

$$\begin{aligned} \rho_{11} &= \frac{1}{2\delta\Gamma_0}(2P_0 + 2P_{z+} - 2P_0) \\ &= \frac{1}{\delta\Gamma_0}P_{z+}, \end{aligned} \quad (164)$$

e

$$\begin{aligned} \rho_{22} &= \frac{1}{2\delta\Gamma_0}[2P_0 - (2P_{z+} - 2P_0)] \\ &= \frac{1}{2\delta\Gamma_0}(4P_0 - 2P_{z+}) \\ &= \frac{1}{\delta\Gamma_0}(2P_0 - P_{z+}), \end{aligned} \quad (165)$$

pela Eq. (153) fica

$$\begin{aligned} \rho_{22} &= \frac{1}{\delta\Gamma_0}(P_{z+} + P_{z-} - P_{z+}) \\ &= \frac{1}{\delta\Gamma_0}P_{z-}. \end{aligned} \quad (166)$$

Usando as Eqs. (150) e (151), podemos escrever os elementos fora da diagonal da matriz densidade em termo das probabilidades como:

$$\begin{aligned} \rho_{21} &= \frac{1}{2\delta\Gamma_0}[2P_{x+} - 2P_0 + i(2P_{y+} - 2P_0)] \\ &= \frac{1}{2\delta\Gamma_0} \left[2P_{x+} - 2 \left(\frac{1}{2}P_{z+} + \frac{1}{2}P_{z-} \right) + i \left(2P_{y+} - 2 \left(\frac{1}{2}P_{z+} + \frac{1}{2}P_{z-} \right) \right) \right] \\ &= \frac{1}{\delta\Gamma_0} \left[P_{x+} - \frac{1}{2}(P_{z+} + P_{z-}) + i \left(P_{y+} - \frac{1}{2}(P_{z+} + P_{z-}) \right) \right], \end{aligned} \quad (167)$$

³ $(S_0 - S_3)^2 - (S_1 - iS_2)^2 \geq 0$.

e

$$\begin{aligned}\rho_{12} &= \frac{2}{2\delta\Gamma_0} [(P_{x+} - P_0) - i(P_{y+} - P_0)] \\ &= \frac{1}{\delta\Gamma_0} \left[P_{x+} - \frac{1}{2}(P_{z+} + P_{z-}) - i \left(P_{y+} - \frac{1}{2}(P_{z+} + P_{z-}) \right) \right],\end{aligned}\quad (168)$$

em termo de representação matricial, os elementos da matriz densidade fica

$$\rho = \frac{1}{\delta\Gamma_0} \begin{pmatrix} P_{z+} & (Re[\uparrow\downarrow] - iIm[\uparrow\downarrow]) \\ (Re[\uparrow\downarrow] + iIm[\uparrow\downarrow]) & P_{z-} \end{pmatrix},\quad (169)$$

onde $Re[\uparrow\downarrow] = P_{x+} - \frac{1}{2}(P_{z+} + P_{z-})$ corresponde a parte real e $Im[\uparrow\downarrow] = [P_{y+} - \frac{1}{2}(P_{z+} + P_{z-})]$ corresponde a parte imaginária. Assim, podemos ver que os elementos de diagonal são sempre positivos e, nesse modelo, são calculados pela probabilidade da projeção de medida de população de *spin* ao longo da direção $z\pm$. Já os elementos fora da diagonal contêm a parte real e a parte imaginária, e podemos calculá-los pela projeção de probabilidades ao longo da direção $x+$, $y+$ e $z\pm$.

3.2.7 A parte real e a parte imaginária

No nosso modelo, os elementos da diagonal serão achados diretamente pela via de população de *spin*. Para obter os elementos fora da diagonal efetuaremos o cálculo da parte real e parte imaginária via projeção de *spin* ao longo de direção $x\pm$ e $y\pm$, respectivamente. Pela Eq. (96), obtivemos a parte real a partir do cálculo do número médio de ocupação ao longo da direção $x\pm$ de seguinte forma: para $x+$

$$\begin{aligned}\langle dx_+^\dagger dx_+ \rangle &= \frac{1}{2} \langle (d_\uparrow^\dagger + d_\downarrow^\dagger)(d_\uparrow + d_\downarrow) \rangle \\ &= \frac{1}{2} [\langle d_\uparrow^\dagger d_\uparrow \rangle + \langle d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \rangle + \langle d_\uparrow^\dagger d_\downarrow \rangle + \langle d_\downarrow^\dagger d_\uparrow \rangle] \\ &= \frac{1}{2} [\langle d_\uparrow^\dagger d_\uparrow \rangle + \langle d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \rangle + 2Re \langle d_\uparrow^\dagger d_\downarrow \rangle],\end{aligned}\quad (170)$$

para $x-$

$$\begin{aligned}\langle dx_-^\dagger dx_- \rangle &= \frac{1}{2} \langle (d_\uparrow^\dagger - d_\downarrow^\dagger)(d_\uparrow - d_\downarrow) \rangle \\ &= \frac{1}{2} [\langle d_\uparrow^\dagger d_\uparrow \rangle + \langle d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \rangle - \langle d_\uparrow^\dagger d_\downarrow \rangle - \langle d_\downarrow^\dagger d_\uparrow \rangle] \\ &= \frac{1}{2} [\langle d_\uparrow^\dagger d_\uparrow \rangle + \langle d_\downarrow^\dagger d_\downarrow \rangle - 2Re \langle d_\uparrow^\dagger d_\downarrow \rangle],\end{aligned}\quad (171)$$

subtraindo (170) com (171) chegamos em⁴

$$\begin{aligned}Re \langle d_\uparrow^\dagger d_\downarrow \rangle &= \frac{1}{2} [\langle dx_+^\dagger dx_+ \rangle - \langle dx_-^\dagger dx_- \rangle] \\ &= \frac{1}{2} [\langle n_{x+} \rangle - \langle n_{x-} \rangle] \\ &= \frac{1}{2} [\langle n_{x+} - n_{x-} \rangle],\end{aligned}\quad (172)$$

⁴ Em Eq. (170) e (171) a parte real aparece pelo fato de que em número complexo $C + C^* = (a + ib) + (a - ib) = 2a$, onde a corresponde a parte real e ib corresponde a parte imaginária.

chamando $Re[\uparrow\downarrow] = Re \langle d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \rangle$, pela definição da Eq. (3) e pela Eq. (125) temos

$$\begin{aligned}
Re[\uparrow\downarrow] &= \frac{1}{2} Tr \{ (n_{x+} - n_{x-}) \rho \} \\
&= \frac{1}{2} Tr \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} & \rho_{34} \\ \rho_{41} & \rho_{42} & \rho_{43} & \rho_{44} \end{pmatrix} \right\} \\
&= -\frac{1}{2} Tr \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} & \rho_{34} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right\} \\
&= -\frac{1}{2} (\rho_{32} + \rho_{23}), \tag{173}
\end{aligned}$$

a parte real que aparece nos elementos fora da diagonal é igual a soma de dois elementos de matriz densidade fora de diagonal (169). Obtivemos a parte imaginária a partir de cálculo do número médio de ocupação ao longo da direção y_{\pm} de seguinte forma: para $y+$

$$\begin{aligned}
\langle dy_{+}^{\dagger} dy_{+} \rangle &= \frac{1}{2} \langle (d_{\uparrow}^{\dagger} + id_{\downarrow}^{\dagger})(d_{\uparrow} - id_{\downarrow}) \rangle \\
&= \frac{1}{2} [\langle d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \rangle + \langle d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \rangle + i \langle d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \rangle - i \langle d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \rangle] \\
&= \frac{1}{2} [\langle d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \rangle + \langle d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \rangle - 2Im \langle d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \rangle], \tag{174}
\end{aligned}$$

para $y-$

$$\begin{aligned}
\langle dy_{-}^{\dagger} dy_{-} \rangle &= \frac{1}{2} \langle (d_{\uparrow}^{\dagger} - id_{\downarrow}^{\dagger})(d_{\uparrow} + id_{\downarrow}) \rangle \\
&= \frac{1}{2} [\langle d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \rangle + \langle d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \rangle - i \langle d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \rangle + i \langle d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \rangle] \\
&= \frac{1}{2} [\langle d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \rangle + \langle d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \rangle + 2Im \langle d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \rangle], \tag{175}
\end{aligned}$$

subtraindo (174) com (175) e isolando a parte imaginária chegamos em⁵

$$\begin{aligned}
Im \langle d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \rangle &= -\frac{1}{2} [\langle dy_{+}^{\dagger} dy_{+} \rangle - \langle dy_{-}^{\dagger} dy_{-} \rangle] \\
&= -\frac{1}{2} [\langle n_{y+} \rangle - \langle n_{y-} \rangle] \\
&= -\frac{1}{2} [\langle n_{y+} - n_{y-} \rangle], \tag{176}
\end{aligned}$$

chamando $Im[\uparrow\downarrow] = Im \langle d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \rangle$, pela Eq. (3) e pela Eq. (126) temos

$$Im[\uparrow\downarrow] = -\frac{1}{2} Tr \{ (n_{y+} - n_{y-}) \rho \}$$

⁵ Em Eq. (174) e (175) a parte imaginária aparece pelo fato de que em número complexo $C - C^* = (a + ib) - (a - ib) = 2ib$, onde a corresponde a parte real e ib corresponde a parte imaginária.

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{2}iTr \left\{ \left(\begin{array}{cccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \left(\begin{array}{cccc} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} & \rho_{34} \\ \rho_{41} & \rho_{42} & \rho_{43} & \rho_{44} \end{array} \right) \right\} \\
&= -\frac{1}{2}iTr \left\{ \left(\begin{array}{cccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\rho_{31} & -\rho_{32} & -\rho_{33} & -\rho_{34} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \right\} \\
&= -\frac{1}{2}i(\rho_{23} - \rho_{32}), \tag{177}
\end{aligned}$$

a parte imaginária é a diferença entre dois elementos de matriz densidade fora de diagonal.

Pela Eq. (2) temos as seguintes relações:

$$\rho_{23} = \langle u_3 | \rho | u_2 \rangle \tag{178}$$

e

$$\rho_{32} = \langle u_2 | \rho | u_3 \rangle, \tag{179}$$

de modo que

$$\begin{aligned}
\rho_{23} + \rho_{32} &= \langle u_3 | \rho | u_2 \rangle + \langle u_2 | \rho | u_3 \rangle \\
&= \langle u_3 | \rho | u_2 \rangle - \langle u_3 | \rho | u_2 \rangle \\
&= 0 \tag{180}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\rho_{23} - \rho_{32} &= \langle u_3 | \rho | u_2 \rangle - \langle u_2 | \rho | u_3 \rangle \\
&= \langle u_3 | \rho | u_2 \rangle + \langle u_3 | \rho | u_2 \rangle \\
&= 2 \langle u_3 | \rho | u_2 \rangle, \tag{181}
\end{aligned}$$

onde usamos o fato de $\langle u_2 | \rho | u_3 \rangle = \langle u_3 | \rho | u_2 \rangle^* = -\langle u_3 | \rho | u_2 \rangle$ ⁶, logo podemos ver que

$$Re[\uparrow\downarrow] = 0 \tag{182}$$

e

$$Im[\uparrow\downarrow] \neq 0 \tag{183}$$

então a Eq (169) fica

$$\rho = \frac{1}{\delta\Gamma_0} \left(\begin{array}{cc} P_{z+} & (0 + iIm[\uparrow\downarrow]) \\ (0 - iIm[\uparrow\downarrow]) & P_{z-} \end{array} \right), \tag{184}$$

constatamos que os elementos da diagonal serão sempre positivos dependendo da orientação de *spin* ao longo da direção $z\pm$. Os elementos fora de diagonal serão preenchidos por valor zero na parte real, mas diferente de zero na parte imaginária.

⁶ Uma matriz, T, é real se todos os seus elementos forem reais, e imaginária se eles forem todos imaginários: real: $T^* = T$; imaginária: $T^* = -T$. (GRIFFITHS, 2011)

Simulação do experimento de tunelamento e análise dos resultados

Esse capítulo contém a descrição detalhada da simulação experimental computacional, baseado em eventos de tunelamento estocástico entre ponto quântico e reservatório, para geração dos dados. Utilizaremos os dados obtidos para reconstruir a matriz densidade do sistema. Analisaremos e discutiremos os diferentes resultados obtidos na forma de gráfico com interpolação via *machine learning*.

4.1 Simulação experimental e Detecção

4.1.1 Implementação experimental

Utilizando *jupyter notebook*, desenvolvemos os códigos que nos permitiram simular a dinâmica de sistema. Para isso, começamos com a importação das principais bibliotecas que vimos em seção 2.4 e também o módulo *collection*.

Seguindo o nosso modelo teórico para reconstrução da matriz densidade, simulamos a dinâmica quântica do sistema utilizando a equação mestra de Lindblad usando o módulo *mesolve* da biblioteca *qutip*, onde fornecemos as variáveis que aparecem na Eq. (127) para *mesolve*. Essas variáveis foram: o Hamiltoniano do ponto quântico, H_0 , dada pela Eq. (100); a base de inicialização do sistema, $|01\rangle$, dada pela Eq. (138), no qual construímos utilizando o produto tensorial da *qutip*; o intervalo de tempo que queremos que o programa execute a simulação, *times*, e definimos esse intervalo de tempo utilizando *linspace* da biblioteca *numpy* de 0 a t_{max} em um salto de N_{tot} ; os operadores de colapso ao longo de cada direção x , y e z , L_{λ_s} , que definimos pelas Eqs. (129), (130) e (131), respectivamente; e os números de ocupação dos elétrons, n_{λ_s} , ao longo de cada direção x , y e z dado pelas Eqs. (111), (112) e (116) - (121).

4.1.2 Parâmetros experimentais

Para aquisição dos dados da dinâmica do sistema, simulamos o sistema em quinhentas mil repetições ($R = 5 \cdot 10^5$) no qual projetamos à saída de um número total de duzentos estados ($N_{tot} = 200$) em um tempo máximo de dois segundos ($t_{max} = 2s$). Dividimos t_{max} em pequenos intervalos de tempo $\delta = \frac{t_{max}}{N_{tot}}$. Para investigar a dinâmica do sistema em um tempo infinito, adicionamos um tempo além do t_{max} dado por $\frac{t_{max} + t_{max}}{N_{tot}}$, como forma de ter uma visão geral do comportamento do sistema. Definimos o tamanho do sistema como $L = 10^5$. Projetamos o campo magnético ao longo da direção x na esfera de Bloch de modo que o ângulo $\theta_B = 0$, logo depois mudamos para 30° , 60° e 90° para verificar como é o comportamento do sistema de acordo com a projeção do campo magnético. Definimos a constante característica como $\Omega = 1$. Para uma intensidade fraca do acoplamento entre o ponto quântico e o reservatório ferromagnéticos, definimos o parâmetro de relaxamento como $\Gamma_0 = 0.1$, logo depois aumentamos para $\Gamma_0 = 0.5$ de modo a verificar como o acoplamento afeta a dinâmica do sistema.

4.1.3 Detecção de estados, valores esperados e probabilidades

Com os parâmetros definidos em 4.1.2, usando *evolution.states* da *qutip*, calculamos a evolução do sistema no qual detectamos os números de estados posteriores ao estado inicial, ψ 's. Usamos *counter* do módulo *collection* para contar números de estados ocupados por elétron detectados ao longo de direção $x\pm$, $y\pm$ e $z\pm$ e também contar os números de estados vazios, isto é, sem preenchimento dos elétrons. Usando *evolution.expect*, calculamos a média ou valor esperado, \mathcal{N}_i , dos estados do sistema de acordo com a orientação dos *spins* ao longo da direção $x\pm$, $y\pm$ e $z\pm$.

Depois procedemos para calcular as probabilidades de obter números de estados com elétrons de acordo com a orientação dos *spins* ao longo de direção $x\pm$, $y\pm$ e $z\pm$. Começamos construindo uma lista de probabilidades dada por $p_{list} = \Gamma_0 \delta \mathcal{N}_i$ para organizar todas as probabilidades possíveis. Para normalizar a probabilidade, fizemos $q = 1 - p$, onde q é a probabilidade para que o último estado seja detectado no sistema e p é a probabilidade total, assim, garantimos que a soma de todas as probabilidades seja sempre igual a 1, que verificamos utilizando *np.sum*. Usando *integrate.simps* da biblioteca *scipy*, implementamos a probabilidade como integral de p_{list} de 0 a δ correspondendo assim a Eq. (140).

Usamos as probabilidades para calcular os elementos da matriz densidade ao longo de direção $x\pm$, $y\pm$ e $z\pm$. Usamos a função *.map()* para fazer com que o programa execute a mesma operação sempre que volte ao início.

Fizemos uma tabela no qual guardamos todos os dados obtidos: valor médio, probabilidades e elementos de matriz densidade de acordo com a orientação de *spins* ao longo da direção $x\pm$, $y\pm$ e $z\pm$.

4.2 Resultados

4.2.1 Estados detectados

O resultado dos 6 primeiros estados detectados a partir da dinâmica do sistema são:

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (185)$$

com $Tr\rho_1 = 1$ e $Tr\rho_1^2 = Tr(\rho_1\rho_1) = 1$.

$$\rho_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 9,803 \cdot 10^{-1} & (0 + 0,031i) & 0 \\ 0 & (0 - 0,031i) & 9,779 \cdot 10^{-4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1,877 \cdot 10^{-2} \end{pmatrix}, \quad (186)$$

com $Tr\rho_2 = 803 \cdot 10^{-1} + 9,779 \cdot 10^{-4} + 1,877 \cdot 10^{-2} = 1$ e $Tr\rho_2^2 = Tr(\rho_2\rho_2) = 8,350 \cdot 10^{-1} < 1$.

$$\rho_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,959 & (0 + 0,061i) & 0 \\ 0 & (0 - 0,061i) & 0,004 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,037 \end{pmatrix}, \quad (187)$$

com $Tr\rho_3 = 0,959 + 0,004 + 0,037 = 1$ e $Tr\rho_3^2 = Tr(\rho_3\rho_3) = 0,682 + 0,003 + 0,029 = 0,714 < 1$.

$$\rho_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,936 & (0 + 0,089i) & 0 \\ 0 & (0 - 0,089i) & 0,008 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,055 \end{pmatrix}, \quad (188)$$

com $Tr\rho_4 = 0,936 + 0,008 + 0,055 = 1$ e $Tr\rho_4^2 = Tr(\rho_4\rho_4) = 0,561 + 0,005 + 0,061 = 0,627 < 1$.

$$\rho_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,912 & (0 + 0,116i) & 0 \\ 0 & (0 - 0,116i) & 0,019 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,073 \end{pmatrix}, \quad (189)$$

com $Tr\rho_5 = 0,912 + 0,019 + 0,073 = 1$ e $Tr\rho_5^2 = Tr(\rho_5\rho_5) = 0,461 + 0,007 + 0,099 = 0,567 < 1$ e

$$\rho_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,887 & (0 + 0,141i) & 0 \\ 0 & (0 - 0,141i) & 0,022 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,090 \end{pmatrix}, \quad (190)$$

com $Tr\rho_6 = 0,887 + 0,022 + 0,090 = 1$ e $Tr\rho_6^2 = Tr(\rho_6\rho_6) = 0,378 + 0,009 + 0,142 = 0,529 < 1$.

4.2.2 Gráficos

As figuras abaixo exibem os gráficos do comportamento da evolução do sistema ao longo de direção $x\pm$, $y\pm$ e $z\pm$.

A Fig. 9 ilustra a contagem de eventos de tunelamento em função de tempo para orientação de *spins* ao longo de cada direção $x\pm$, $y\pm$, e $z\pm$. A Fig. 9(a) é a contagem de evento de tunelamento para $\Gamma_0 = 0.1$ e Fig. 9(b) é a contagem de evento de tunelamento para $\Gamma_0 = 0.5$. A Fig. 10 ilustra o resultado dos elementos de matriz ao longo de direção $x\pm$, $y\pm$ e $z\pm$ via *machine learning* (seção 2.3) no qual utilizamos o módulo *sklearn.preprocessing* da biblioteca *PolynomialFeatures* que utiliza a Eq. (90) para prever os resultados dos elementos de matriz e a Eq. (89) para minimizar o erro residual, mostrando assim a qualidade do resultado do modelo. Usando a *pandas*, extraímos os dados a partir da Fig. 9 (probabilidades) que serviram de entrada para implementação de regressão polinomial de grau 10. A Fig. 10(a) é o resultado do modelo para $\Gamma_0 = 0.1$ e a Fig. 10(b) é o resultado do modelo para $\Gamma_0 = 0.5$.

A Fig. 11 exhibe o resultado de quatro elementos reconstruídos em uma comparação com o modelo ideal (sistema fechado - sem perda de elétrons) em que $\Gamma_0 = 0$. Em painéis (a) e (b) mostramos o resultado dos elementos de diagonal e em painéis (c) e (d) elementos fora de diagonal. A Fig. 11(a) é a comparação com $\Gamma_0 = 0.1$ e a Fig. 11(b) é a comparação com $\Gamma_0 = 0.5$.

A Fig. 12 ilustra os estados detectados em pontos na esfera de Bloch. Ela mostra como é a dinâmica dos estados durante a simulação experimental com o ângulo $\theta_B = 0$. A Fig. 12(a) é para $\Gamma_0 = 0.1$ e a Fig. 12(b) é para $\Gamma_0 = 0.5$.

4.3 Discussão dos Resultados

4.3.1 Estados detectados

A Eq. (185) corresponde ao estado inicial do sistema, com passar do tempo, o sistema evoluiu para estado da Eq. (186), depois para Eq. (187), assim para frente. A partir

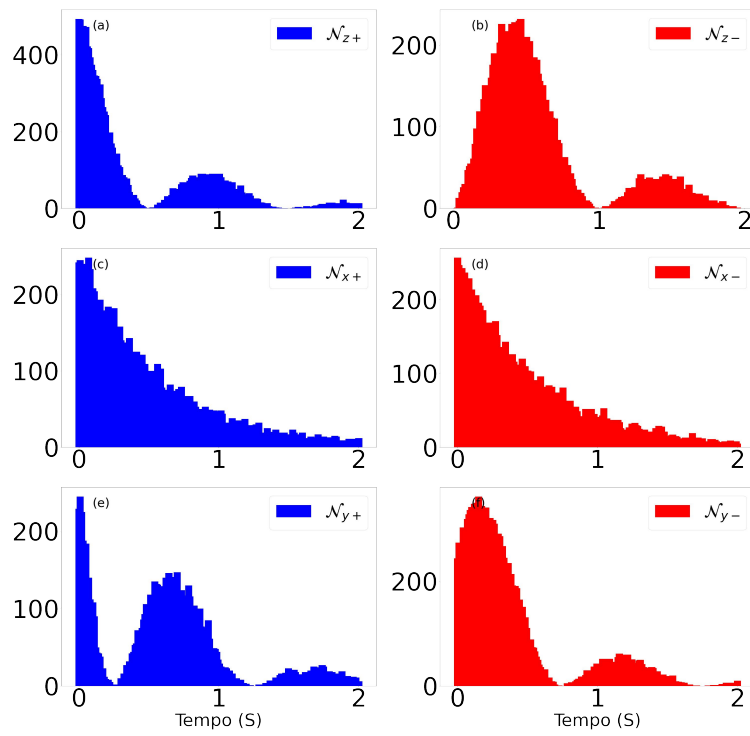
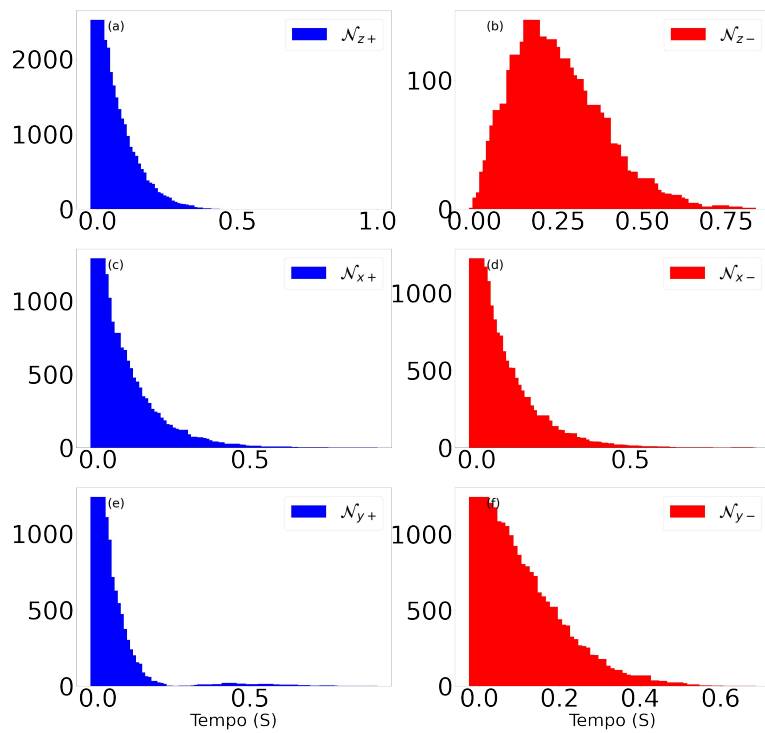
(a) Detecção para $\Gamma_0 = 0.1$ (b) Detecção para $\Gamma_0 = 0.5$

Figura 9 – Contagem de eventos de tunelamento em função de tempo (probabilidade) para orientação de *spin* ao longo de direção x , y e z .

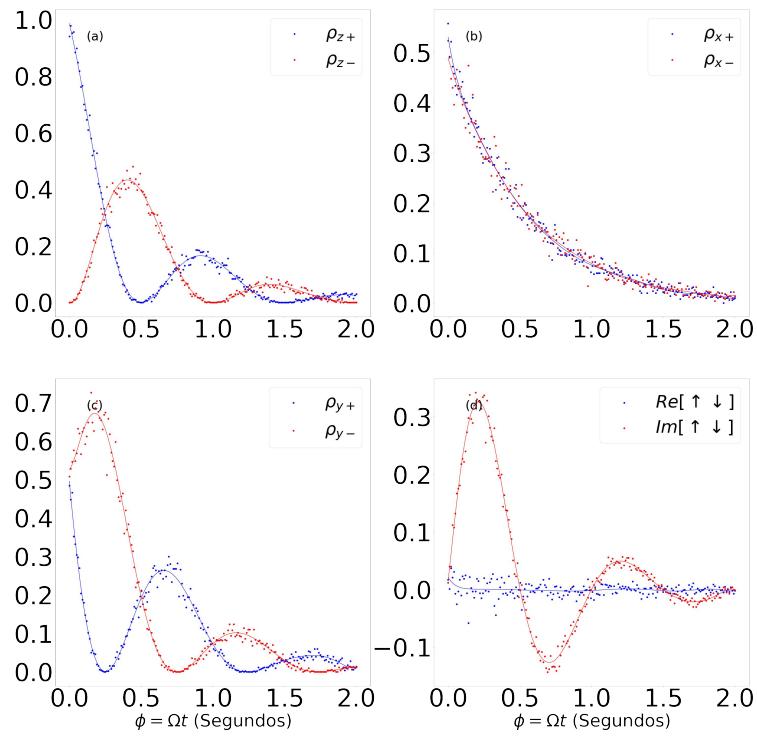
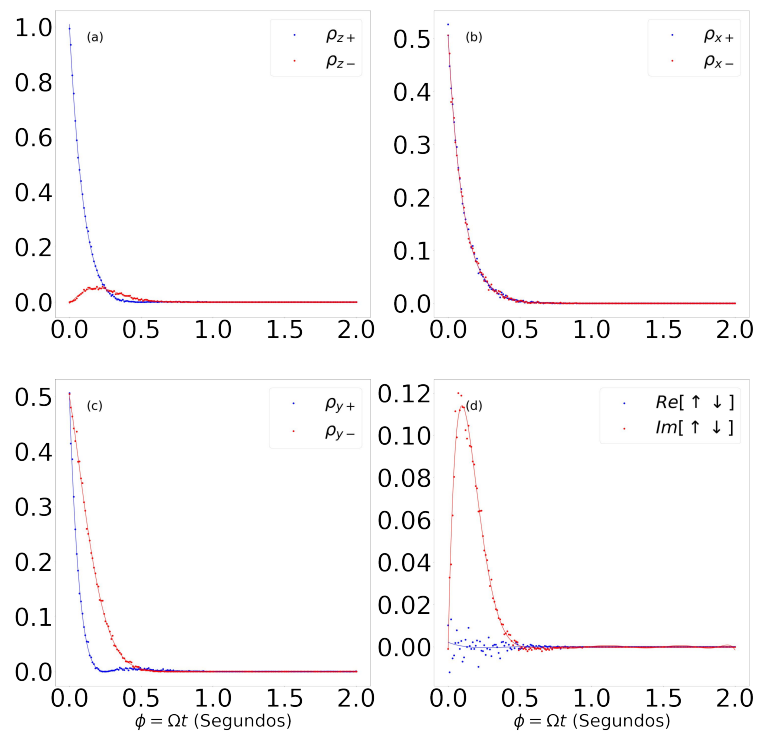
(a) Detecção para $\Gamma_0 = 0.1$ (b) Detecção para $\Gamma_0 = 0.5$

Figura 10 – Matriz densidade determinada a partir das probabilidades da Fig. 9 ao longo de direção x_{\pm} , y_{\pm} e z_{\pm} .

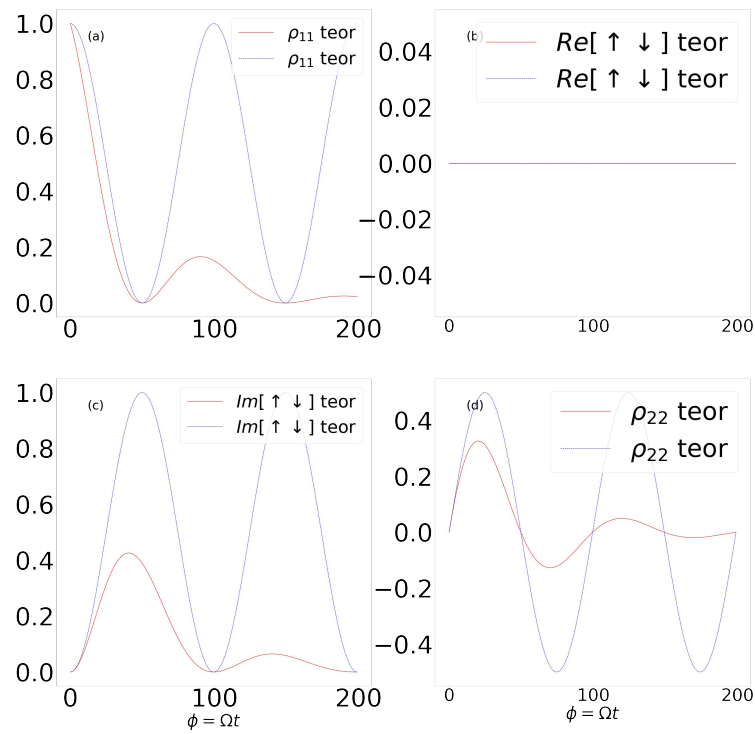
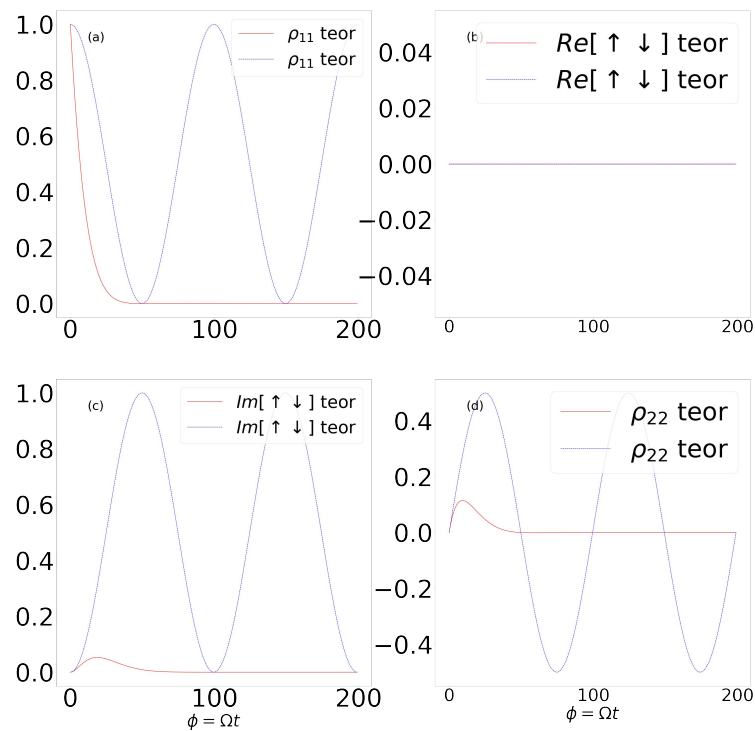
(a) Detecção para $\Gamma_0 = 0.1$ e $\Gamma_0 = 0$ (b) Detecção para $\Gamma_0 = 0.5$ e $\Gamma_0 = 0$

Figura 11 – Elementos de matriz densidade reconstruída. Análise comparativa entre o sistema fechado ($\Gamma_0 = 0$) e sistema aberto ($\Gamma_0 \neq 0$).

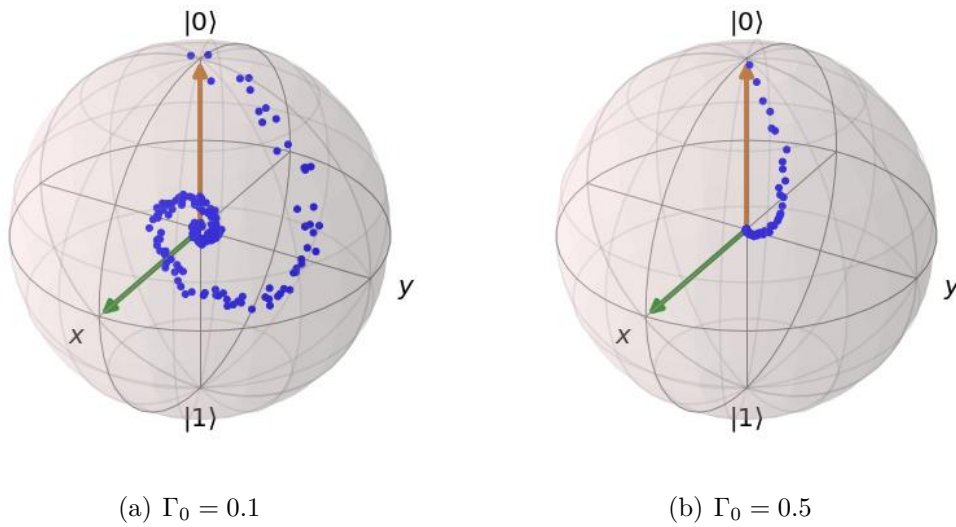


Figura 12 – Dinâmica de estados detectados na Esfera de Bloch com $\theta_B = 0$. A seta verde indica direção do campo magnético e a seta laranja indica o estado inicial do sistema.

da Eq. (186) notamos um padrão aparecendo no comportamento do sistema em que os quatro elementos centrais mais o último elemento da diagonal vem sendo preenchidos, fora eles, os outros elementos não têm qualquer preenchimento. Esses resultados correspondem ao esperado, como vimos em Eq. (184), onde mostramos o formalismo matemático para reconstrução dos quatro elementos que correspondem aos elementos centrais dos estados detectados a partir da dinâmica do sistema. O primeiro estado não foi preenchido por qualquer elétron por exclusão de estado com dupla ocupação. Observamos que o último estado que era vazio foi preenchido durante a dinâmica.

A soma dos elementos de diagonal, que corresponde ao traço de estado, é sempre igual a 1, o que mostra a normalização de estados, enquanto que os elementos fora da diagonal contêm a parte real igual a zero e a parte imaginária diferente de zero, como vimos em Eq. (184). Observamos pelos cálculos efetuados que o sistema se inicializa em um estado puro dado pela Eq. (185) e vai se tornando em estados de mistura com passar de tempo, e devido a perda do elétron no sistema, essa mistura vai se desaparecendo indo a zero, como mostra os cálculos de $Tr\rho^2$.

4.3.2 Gráficos

Observamos que os gráficos das Figs. 9 - 11 exibem a oscilação de Rabi ao longo de direção $y\pm$ e $z\pm$ e, em contraste, ao longo da direção x eles apresentam o decaimento exponencial. Isso se deve a presença de campo magnético ao longo da direção x . O comportamento oscilatório que observamos ao longo da direção $y\pm$ e $z\pm$ mostra a precessão de *spin* no plano yz na esfera de Bloch, como observamos em Fig. 12. Em contraste, o comportamento exponencial que observamos ao longo da direção $x\pm$ mostra que não há

precessão de *spin* nessa direção, o que se deve ao campo magnético que impede a dinâmica nessa direção. O decaimento que observamos nos gráficos é devido a perda de elétrons que o sistema vem sofrendo com passar de tempo devido acoplamento do sistema com o reservatório.

Vimos como a dinâmica do sistema é afetada pelo parâmetro de relaxamento, Γ_0 , responsável pelo dreno de elétron no sistema. Observamos que quanto maior é o valor de Γ_0 mais rápido o sistema relaxa, isto é, mais rápido o sistema perde os elétrons. Observamos em Figs. 9(a) - 12(a) (que exibem $\Gamma_0 = 0.1$) um relaxamento mais lento em comparação com as Figs. 9(b) - 12(b) (que exibem $\Gamma_0 = 0.5$) em que o relaxamento é muito mais rápido, exibindo assim um forte acoplamento entre o ponto quântico e o reservatório.

Observamos em painel (a), (c) e (d) da Fig. 11 uma oscilação amortecida para sistema aberto (linhas vermelhas) em comparação com o sistema fechado em que a oscilação não é amortecida (linhas azuis). Já em painel (c) observamos que as amplitudes das probabilidades se anulam de modo que a dinâmica é zero. Os Painéis (a) e (d) exibem o comportamento dos elementos de diagonal em Eq. (184), que desaparecerão com tempo devido a perda de elétrons. Os painéis (b) e (c) exibem o comportamento dos elementos fora da diagonal em Eq. (184), que desaparecem devido a decoerência.

Na esfera de Bloch da Fig. 12 a seta verde indica o sentido do campo magnético, a seta laranja indica o estado inicial do sistema, e os pontos azuis são os estados detectados. Observamos que com o campo magnético alinhado com eixo x ($\theta_B = 0$) a precessão de estado ocorre de direita para esquerda, saindo de $|0\rangle = |\uparrow\rangle$, passando por $|y\pm\rangle$ e $|0\rangle = |\downarrow\rangle$, e vai decaindo à origem. A precessão pára quando chega em estado $x\pm$, isto é, não temos qualquer dinâmica ao longo da direção $x\pm$, devido ao campo magnético nessa direção.

Por fim, vale observar que o modelo predito pelo cálculo de *machine learning* exibe excelente concordância com os dados gerados estatisticamente, como mostra o gráfico da regressão polinomial em painéis da Fig. 10 que exibe a flutuação dos dados gerados em torno da linha de regressão gerada via *machine learning*. Fizemos os cálculos do coeficiente de determinação, R^2 , verificamos que houve pouca flutuação em torno do resultado gerado pelo cálculo de *machine learning* de modo que R^2 apresenta valores próximos de 1. A maior flutuação aconteceu em torno da linha de $Re[\pm]$ que apresenta um baixo coeficiente $R^2 = 0,09$. Por exemplo, no painel (a) da Fig. 10 vemos que ρ_{z+} e ρ_{z-} apresentam excelente concordância com as curvas geradas pelo modelo de *machine learning* cujos coeficientes de determinação valem $R^2 = 0,995$ e $R^2 = 0,984$, respectivamente ¹. Isso mostra a eficiência do modelo, pois o erro residual é pequeno.

¹ Verificar esses valores na tabela *score* do anexo A.

Conclusão

A partir da dinâmica quântica do sistema composto por ponto quântico e reservatório, fomos capazes de reconstruir a matriz densidade de um único *qubit* de *spin* do elétron usando transporte quântico de *spin* polarizado. Pela simulação experimental computacional do sistema, fomos capazes de confirmar o modelo teórico que mostra a reconstrução a partir da contagem da probabilidade do evento de tunelamento ao longo da direção x_{\pm} , y_{\pm} e z_{\pm} . Os elementos da diagonal que representam a população de estado apresentam oscilação de Rabi. A precessão de estado do sistema depende da orientação do campo magnético ao longo do plano xy , então, esperamos que uma mudança na direção do campo magnético leva uma alteração na dinâmica do estado. Os elementos fora de diagonal que representam a coerência apresentam a parte real igual a zero e a parte imaginária diferente de zero. O estado do sistema é fortemente afetado pelo parâmetro de relaxamento tanto que uma pequena alteração no seu valor leva a rápida perda eletrônica no sistema. De modo geral, o modelo de *machine learning* exibe excelente resultado, como podemos ver pelos valores do coeficiente de determinação.

Referências

- ALTEPETER, J. B.; JEFFREY, E. R.; KWIAT, P. G. Photonic state tomography. **Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics**, Elsevier, v. 52, p. 105–159, 2005.
- AMARAL, B.; BARAVIERA, A. T.; CUNHA, M. T. Mecânica quântica para matemáticos em formação. **Impa-28th Colóquio Brasileiro de Matemática**, 2011.
- ASSUNÇÃO, M. d. O. et al. Reflexão de andreev cruzada via dubleto de autler-townes em uma junção ponto quântico-supercondutor. Universidade Federal de Uberlândia, 2017.
- BARCELOS, C. A. Z.; ANDRADE, E. X. de; BOAVENTURA, M. Notas em matemática aplicada 36.
- BARNETT, S. M. **Quantum Information**. [S.l.]: Oxford University Press Inc., New York, 2009.
- BASSALO, J. M. F.; CATTANI, M. S. D. **Elementos de física matemática: equações integrais e integrais de trajetória não relativísticas**. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2012.
- BERNARDO, B. de L. Unified quantum density matrix description of coherence and polarization. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 381, n. 28, p. 2239–2245, 2017.
- BISOGNIN, R. et al. Quantum tomography of electrical currents. **Nature communications**, Nature Publishing Group, v. 10, n. 1, p. 1–12, 2019.
- BRASIL, C. A.; FANCHINI, F. F.; NAPOLITANO, R. d. J. A simple derivation of the lindblad equation. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, SciELO Brasil, v. 35, p. 01–09, 2013.
- BREUER, H.-P.; PETRUCCIONE, F. et al. **The theory of open quantum systems**. [S.l.]: Oxford University Press on Demand, 2002.
- BRUUS, H.; FLENSBERG, K. **Introduction to many-body quantum theory in condensed matter physics**. [S.l.]: Ørsted Laboratory, Niels Bohr Institute, 2002.
- COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. Quantum mechanics, volume 1. **Quantum Mechanics**, v. 1, p. 898, 1986.

- COUTINHO, R. M. et al. Transporte eletrônico de carga e spin em cadeias de pontos quânticos. Universidade Federal de Uberlândia, 2013.
- CRAMER, M. et al. Efficient quantum state tomography. **Nature communications**, Nature Publishing Group, v. 1, n. 1, p. 1–7, 2010.
- FERREIRA, J. L. M. Análise da relação entre coerência e polarização: uma visão quântica. Universidade Federal da Paraíba, 2022.
- FLIESSBACH, T.; JR, J. da P. **Curso de física estatística**. [S.l.: s.n.], 2000.
- GEEKSFORGEES. **Implementation of Polynomial Regression**. 2022. Url:<https://www.geeksforgeeks.org/python-implementation-of-polynomial-regression/>.
- GOLDSTEIN, D. **Polarized light**. [S.l.: s.n.], 2003.
- GRIFFITHS, D. J. **Mecânica Quântica**. [S.l.]: São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2011.
- HAMAYA, K. et al. Spin transport through a single self-assembled inas quantum dot with ferromagnetic leads. **Applied physics letters**, American Institute of Physics, v. 90, n. 5, p. 053108, 2007.
- HURWITZ, J.; KIRSCH, D. Machine learning for dummies. **IBM Limited Edition**, John Wiley & Sons, Inc, v. 75, 2018.
- JAMES, D. F. et al. Measurement of qubits. **Physical Review A**, APS, v. 64, n. 5, p. 052312, 2001.
- JOOS, E. et al. **Decoherence and the appearance of a classical world in quantum theory**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013.
- KATSAROS, G. et al. Hybrid superconductor-semiconductor devices made from self-assembled sige nanocrystals on silicon. **Nat Nanotechnol**, 10.1038/nnano.2010.84. Epub 2010 May 2. PMID: 20436467, v. 5, n. 6, p. 458–64, 2010.
- KOSAKA, H. et al. Spin state tomography of optically injected electrons in a semiconductor. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 457, n. 7230, p. 702–705, 2009.
- LEARN, S. **scikit-learn: Machine Learning in Python**. 2022. Url:<https://scikit-learn.org/stable/>.
- LVOVSKY, A. I.; RAYMER, M. G. Continuous-variable optical quantum state tomography. 2008.
- MATPLOTLIB. **Matplotlib: Visualization with Python**. 2022. Url:<https://matplotlib.org/>.
- NATION, P. D.; JOHANSSON, J. Qutip: Quantum toolbox in python. **online at <http://qutip.org>**, 2011.
- NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. **Quantum computation and quantum information**. [S.l.]: American Association of Physics Teachers, 2002.
- NOVAES, M.; STUDART, N. **Mecânica quântica básica**. [S.l.]: Editora Livraria da Física São Paulo, 2016.

- NUMPY. **NumPy documentation**. 2022. Url:<https://numpy.org/doc/stable/>.
- OLIVEIRA, P. A. A. d. et al. Emaranhamento eletrônico em moléculas de pontos quânticos semicondutores. Universidade Federal de Uberlândia, 2015.
- PANDAS. **Pandas**. 2022. Url:<https://pandas.pydata.org/>.
- PIMENTA, W. M. Tomografia experimental de estados quânticos: implementação de tomografia mínima. Universidade Federal de Minas Gerais, 2010.
- PYTHON. **Welcome to Python**. 2022. Url:<https://www.python.org/about/>.
- QUTIP. **QuTiP: Quantum Toolbox in Python**. 2022. Url:<https://qutip.org/>.
- SANTOS, A. F. dos. **Utilização de um formalismo quântico unificado da polarização e da coerência no estudo da informação quântica codificada na luz**. Monografia (Mestrado) — CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA UNIDADE ACADÊMICA DE FÍSICA, UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE, Campina Grande, 2018.
- SCHILLER, S. et al. Quantum statistics of the squeezed vacuum by measurement of the density matrix in the number state representation. **Physical review letters**, APS, v. 77, n. 14, p. 2933, 1996.
- SCIPY. **SCIPY: FUNDAMENTAL ALGORITHMS**. 2022. Url:<https://scipy.org/>.
- SOUZA, F. M. Density matrix reconstruction with spin-polarized current. **arXiv preprint arXiv:2101.10821**, 2021.
- STOJILJKOVIC, M. Linear regression in python. **Real Python**. <https://realpython.com/linear-regression-in-python/>. Accessed, v. 8, 2021.
- VOGEL, K.; RISKEN, H. Determination of quasiprobability distributions in terms of probability distributions for the rotated quadrature phase. **Physical Review A**, APS, v. 40, n. 5, p. 2847, 1989.
- WIKIPÉDIA, a. e. l. **Parâmetros de Stokes**. 2018. Url:https://pt.wikipedia.org/wiki/Parâmetros_de_Stokes.

Apêndices

Dinâmica Quântica de um sistema aberto: Equação mestra de Lindblad

Nesse apêndice faremos a demonstração da equação mestra de Lindblad, útil para analisar a dinâmica de sistema aberto - sistema que interage com ambiente.

A.0.1 Equação Mestra de Lindblad

Um sistema é dito aberto se existir alguma interação entre o sistema e o ambiente o que leva a perda de coerência quântica. A interação entre o sistema e o ambiente faz com que a evolução não possa ser mais descrita pela equação de von Neumann (Eq. (10)) devido ao grande número de graus de liberdade (BRASIL; FANCHINI; NAPOLITANO, 2013). Precisamos de uma equação capaz de descrever a dinâmica de sistema aberto levando em consideração os inúmeros graus de liberdade. Aqui utilizaremos a **equação mestra de Lindblad**, útil para analisar a dinâmica de sistema aberto - sistema que interage com ambiente (um reservatório¹, por exemplo).

Consideramos um sistema quântico S fracamente acoplado ao reservatório R . O Hamiltoniano total é dado por

$$H(t) = H_0 + V(t), \quad (191)$$

onde $H_0 = H_S + H_R$ é o Hamiltoniano sem acoplamento do sistema-reservatório e $V(t)$ é o Hamiltoniano que acopla esses dois subsistemas. Para descrever a dinâmica do sistema aberto é conveniente passarmos da representação de Schrödinger para representação de interação². Seja $|\psi(t)\rangle$ o vetor de estado na representação de Schrödinger³, o vetor de

¹ O termo reservatório se refere ao ambiente com um número infinito de graus de liberdade tal que os modos de frequências de reservatório formam um contínuo (BREUER; PETRUCCIONE et al., 2002).

² Nessa representação o vetor de estado e o operador de estado dependem do tempo e o Hamiltoniano não depende do tempo. A ideia chave por trás da representação de interação é separar a evolução temporal trivial devido a H_0 intrincado a da evolução temporal trivial devido a $V(t)$ (BRUUS; FLENSBERG, 2002). Essa representação é o caso mais geral da representação de Schrödinger e Heisenberg.

³ Diferente da representação de Heisenberg em que o operador é dependente do tempo, na representação de Schrödinger o vetor de estado é que depende do tempo, o operador e o Hamiltoniano do sistema

estado na representação de interação $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ é dado por

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = U_0(t) |\psi(t)\rangle, \quad (192)$$

onde $U_0(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}$, cuja evolução temporal expressada pela equação de Schrödinger é dada por

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} |\tilde{\psi}(t)\rangle &= \frac{d}{dt} (U_0(t) |\psi(t)\rangle) \\ &= \left(\frac{d}{dt} U_0(t) \right) |\psi(t)\rangle + U_0(t) \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \\ &= -\frac{1}{i\hbar} H_0 U_0(t) |\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} U_0(t) H_S |\psi(t)\rangle, \end{aligned} \quad (193)$$

sendo $U_0(t)U_0^\dagger(t) = I$, então

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} |\tilde{\psi}(t)\rangle &= -\frac{1}{i\hbar} H_0 U_0(t) U_0^\dagger(t) U_0(t) |\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} U_0(t) H_S U_0^\dagger(t) U_0(t) |\psi(t)\rangle \\ &= -\frac{1}{i\hbar} U_0(t) H_0 U_0^\dagger(t) |\tilde{\psi}(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} U_0(t) H_S U_0^\dagger(t) |\tilde{\psi}(t)\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} U_0(t) (H_S - H_0) U_0^\dagger(t) |\tilde{\psi}(t)\rangle, \end{aligned} \quad (194)$$

seja $V = H_S - H_0$, temos

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\tilde{\psi}(t)\rangle = U_0(t) V U_0^\dagger(t) |\tilde{\psi}(t)\rangle, \quad (195)$$

logo

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\tilde{\psi}(t)\rangle = \tilde{V}(t) |\tilde{\psi}(t)\rangle, \quad (196)$$

onde

$$\tilde{V}(t) = U_0(t) V U_0^\dagger(t), \quad (197)$$

é o Hamiltoniano na representação de interação. Podemos definir o operador densidade na representação de interação fazendo

$$\tilde{\rho}(t) = |\tilde{\psi}(t)\rangle \langle \tilde{\psi}(t)|, \quad (198)$$

pela Eq. (192) temos

$$\tilde{\rho}(t) = U_0(t) |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| U_0^\dagger(t), \quad (199)$$

sendo $\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$ o operador densidade na representação de Schrödinger, temos

$$\tilde{\rho}(t) = U_0(t) \rho(t) U_0^\dagger(t). \quad (200)$$

Derivando a Eq. (198)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\rho}(t) &= \frac{d}{dt} (|\tilde{\psi}(t)\rangle \langle \tilde{\psi}(t)|) \\ &= \left(\frac{d}{dt} |\tilde{\psi}(t)\rangle \right) \langle \tilde{\psi}(t)| + |\tilde{\psi}(t)\rangle \left(\frac{d}{dt} \langle \tilde{\psi}(t)| \right), \end{aligned} \quad (201)$$

não dependem do tempo (BRUUS; FLENSBERG, 2002)(BREUER; PETRUCCIONE et al., 2002).

e pela Eq. (196)

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\tilde{\rho}(t) &= \frac{1}{i\hbar}\tilde{V}(t)|\tilde{\psi}(t)\rangle\langle\tilde{\psi}(t)| - \frac{1}{i\hbar}|\tilde{\psi}(t)\rangle\langle\tilde{\psi}(t)|\tilde{V}(t) \\ &= \frac{1}{i\hbar}\left(\tilde{V}(t)\tilde{\rho}(t) - \tilde{\rho}(t)\tilde{V}(t)\right),\end{aligned}\quad (202)$$

podemos mostrar que a equação de movimento na representação de interação, correspondente a equação de von-Neumann, é dada por

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}\left[\tilde{V}(t), \tilde{\rho}(t)\right]. \quad (203)$$

O que queremos é encontrar a equação que expressa a evolução temporal do sistema. Para isso, precisamos utilizar a equação de densidade reduzida que estudamos em subseção 2.1.1 que mostra que

$$\tilde{\rho}_S(t) = Tr_R\{\tilde{\rho}(t)\}, \quad (204)$$

onde Tr_R indica o traço sobre os graus de liberdade do reservatório.

Integrando a Eq. (203) em função do tempo

$$\int_0^t d\tilde{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t \left[\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}(t')\right] dt', \quad (205)$$

obtemos

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}(0) - \frac{i}{\hbar}\int_0^t \left[\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}(t')\right] dt', \quad (206)$$

substituir a Eq. (206) em (203) como sendo nosso ponto inicial de uma expansão perturbativa temos

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}\left[\tilde{V}(t), \tilde{\rho}(0)\right] - \frac{i}{\hbar^2}\left[\tilde{V}(t), \int_0^t \left[\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}(t')\right] dt'\right], \quad (207)$$

cujas soluções são obtidas a partir de uso de aproximações. Tomando o traço sobre os graus de liberdade do reservatório temos

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_S(t) = -\frac{i}{\hbar}Tr_R\left\{\left[\tilde{V}(t), \tilde{\rho}(0)\right]\right\} - \frac{i}{\hbar^2}Tr_R\left\{\left[\tilde{V}(t), \int_0^t \left[\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}(t')\right] dt'\right]\right\} dt', \quad (208)$$

e uma vez que assumimos que não há correlação entre o sistema e o reservatório no tempo inicial ($t = 0$), podemos ver que o primeiro termo a direita da Eq. (208) desaparece. Podemos observar isso fazendo a seguinte demonstração:

$$\left[\tilde{V}(t), \tilde{\rho}(0)\right] = \tilde{V}(t)\tilde{\rho}(0) - \tilde{\rho}(0)\tilde{V}(t), \quad (209)$$

pela Eq. (200) podemos ver que $\tilde{\rho}(0) = \rho(0)$, e pela Eq. (197), com $H_0 = H_S \otimes I_R + I_S \otimes H_R$, temos

$$\begin{aligned}\left[\tilde{V}(t), \tilde{\rho}(0)\right] &= e^{\frac{i}{\hbar}(H_S \otimes I_R + I_S \otimes H_R)t} V e^{-\frac{i}{\hbar}(H_S \otimes I_R + I_S \otimes H_R)t} \rho(0) \\ &\quad - \rho(0) e^{\frac{i}{\hbar}(H_S \otimes I_R + I_S \otimes H_R)t} V e^{-\frac{i}{\hbar}(H_S \otimes I_R + I_S \otimes H_R)t},\end{aligned}\quad (210)$$

uma vez que

$$\begin{aligned}
[H_S \otimes I_R, I_S \otimes H_R] &= (H_S \otimes I_R)(I_S \otimes H_R) - (I_S \otimes H_R)(H_S \otimes I_R) \\
&= H_S I_S \otimes I_R H_R - I_S H_S \otimes H_R I_R \\
&= H_S \otimes H_R - H_S \otimes H_R \\
&= 0,
\end{aligned} \tag{211}$$

comutam, podemos reescrever a Eq. (210) como

$$\begin{aligned}
[\tilde{V}(t), \tilde{\rho}(0)] &= e^{\frac{i}{\hbar}(H_S \otimes I_R)t} e^{\frac{i}{\hbar}(I_S \otimes H_R)t} V e^{-\frac{i}{\hbar}(H_S \otimes I_R)t} e^{-\frac{i}{\hbar}(I_S \otimes H_R)t} \rho(0) \\
&\quad - \rho(0) e^{\frac{i}{\hbar}(H_S \otimes I_R)t} e^{\frac{i}{\hbar}(I_S \otimes H_R)t} V e^{-\frac{i}{\hbar}(H_S \otimes I_R)t} e^{-\frac{i}{\hbar}(I_S \otimes H_R)t},
\end{aligned} \tag{212}$$

pela expansão do exponencial

$$\begin{aligned}
e^{\frac{i}{\hbar}(H_S \otimes I_R)t} &= (I_S \otimes I_R) + \frac{i}{\hbar} (H_S \otimes I_R)t + \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 (H_S \otimes I_R)^2 t^2 + \dots \\
&= \left(I_S + iH_S + \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 H_S^2 + \dots \right) \otimes I_R \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}H_S t} \otimes I_R
\end{aligned} \tag{213}$$

pela analogia

$$e^{\frac{i}{\hbar}(I_S \otimes H_R)t} = I_S \otimes e^{\frac{i}{\hbar}H_R t}, \tag{214}$$

e sendo que $[H_S, \rho(0)] = 0$, a Eq. (212) torna

$$\begin{aligned}
[\tilde{V}(t), \tilde{\rho}(0)] &= e^{\frac{i}{\hbar}H_S t} \otimes e^{\frac{i}{\hbar}H_R t} V \rho(0) e^{-\frac{i}{\hbar}H_S t} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar}H_R t} \\
&\quad - e^{\frac{i}{\hbar}H_S t} \otimes e^{\frac{i}{\hbar}H_R t} \rho(0) V e^{-\frac{i}{\hbar}H_S t} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar}H_R t},
\end{aligned} \tag{215}$$

escrevendo o operador densidade e o hamiltoniano de interação como

$$\rho(0) = \rho_{S0} \otimes \rho_{R0}, \tag{216}$$

e

$$V = S \otimes R^\dagger + S^\dagger \otimes R, \tag{217}$$

respectivamente, onde S é o operador que atua no sistema S e R é o operador que atua no sistema R , temos

$$\begin{aligned}
[\tilde{V}(t), \tilde{\rho}(0)] &= e^{\frac{i}{\hbar}H_S t} \otimes e^{\frac{i}{\hbar}H_R t} (S \otimes R^\dagger + S^\dagger \otimes R) (\rho_{S0} \otimes \rho_{R0}) e^{-\frac{i}{\hbar}H_S t} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar}H_R t} \\
&\quad - e^{\frac{i}{\hbar}H_S t} \otimes e^{\frac{i}{\hbar}H_R t} (\rho_{S0} \otimes \rho_{R0}) (S \otimes R^\dagger + S^\dagger \otimes R) e^{-\frac{i}{\hbar}H_S t} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar}H_R t} \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}H_S t} \otimes e^{\frac{i}{\hbar}H_R t} (S \otimes R^\dagger) (\rho_{S0} \otimes \rho_{R0}) e^{-\frac{i}{\hbar}H_S t} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar}H_R t} \\
&\quad + e^{\frac{i}{\hbar}H_S t} \otimes e^{\frac{i}{\hbar}H_R t} (S^\dagger \otimes R) (\rho_{S0} \otimes \rho_{R0}) e^{-\frac{i}{\hbar}H_S t} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar}H_R t} \\
&\quad - e^{\frac{i}{\hbar}H_S t} \otimes e^{\frac{i}{\hbar}H_R t} (\rho_{S0} \otimes \rho_{R0}) (S \otimes R^\dagger) e^{-\frac{i}{\hbar}H_S t} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar}H_R t} \\
&\quad - e^{\frac{i}{\hbar}H_S t} \otimes e^{\frac{i}{\hbar}H_R t} (\rho_{S0} \otimes \rho_{R0}) (S^\dagger \otimes R) e^{-\frac{i}{\hbar}H_S t} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar}H_R t}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - e^{\frac{i}{\hbar}Hst} \otimes e^{\frac{i}{\hbar}H_Rt} (\rho_{S0} \otimes \rho_{R0}) (S^\dagger \otimes R) e^{-\frac{i}{\hbar}Hst} \otimes e^{-\frac{i}{\hbar}H_Rt} \\
& = e^{\frac{i}{\hbar}Hst} S \rho_{S0} e^{-\frac{i}{\hbar}Hst} \otimes e^{\frac{i}{\hbar}H_Rt} R^\dagger \rho_{R0} e^{-\frac{i}{\hbar}H_Rt} + e^{\frac{i}{\hbar}Hst} S^\dagger \rho_{S0} e^{-\frac{i}{\hbar}Hst} \otimes e^{\frac{i}{\hbar}H_Rt} R \rho_{R0} e^{-\frac{i}{\hbar}H_Rt} \\
& - e^{\frac{i}{\hbar}Hst} \rho_{S0} S e^{-\frac{i}{\hbar}Hst} \otimes e^{\frac{i}{\hbar}H_Rt} \rho_{R0} R^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}H_Rt} - e^{\frac{i}{\hbar}Hst} \rho_{S0} S^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}Hst} \otimes e^{\frac{i}{\hbar}H_Rt} \rho_{R0} R e^{-\frac{i}{\hbar}H_Rt},
\end{aligned} \tag{218}$$

tomando o traço sobre os graus de liberdade do reservatório em Eq. (218) e usando a propriedade cíclica do traço temos

$$\begin{aligned}
Tr_R \left\{ \left[\tilde{V}(t), \tilde{\rho}(0) \right] \right\} & = e^{\frac{i}{\hbar}Hst} S \rho_{S0} e^{-\frac{i}{\hbar}Hst} Tr_R \left\{ e^{\frac{i}{\hbar}H_Rt} e^{-\frac{i}{\hbar}H_Rt} R^\dagger \rho_{R0} \right\} \\
& + e^{\frac{i}{\hbar}Hst} S^\dagger \rho_{S0} e^{-\frac{i}{\hbar}Hst} Tr_R \left\{ e^{\frac{i}{\hbar}H_Rt} e^{-\frac{i}{\hbar}H_Rt} R \rho_{R0} \right\} \\
& - e^{\frac{i}{\hbar}Hst} \rho_{S0} S e^{-\frac{i}{\hbar}Hst} Tr_R \left\{ e^{\frac{i}{\hbar}H_Rt} e^{-\frac{i}{\hbar}H_Rt} R^\dagger \rho_{R0} \right\} \\
& - e^{\frac{i}{\hbar}Hst} \rho_{S0} S^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}Hst} Tr_R \left\{ e^{\frac{i}{\hbar}H_Rt} e^{-\frac{i}{\hbar}H_Rt} R \rho_{R0} \right\},
\end{aligned} \tag{219}$$

juntando os termos semelhantes temos

$$\begin{aligned}
Tr_R \left\{ \left[\tilde{V}(t), \tilde{\rho}(0) \right] \right\} & = e^{\frac{i}{\hbar}Hst} [S \rho_{S0} - \rho_{S0} S] e^{-\frac{i}{\hbar}Hst} Tr_R \left\{ R^\dagger \rho_{R0} \right\} \\
& + e^{\frac{i}{\hbar}Hst} [S^\dagger \rho_{S0} - \rho_{S0} S^\dagger] e^{-\frac{i}{\hbar}Hst} Tr_R \left\{ R \rho_{R0} \right\},
\end{aligned} \tag{220}$$

sendo que os termos de traço em uma base $|k\rangle$ ficam

$$Tr_R \left\{ R^\dagger \rho_{R0} \right\} = \sum_k \langle k | R^\dagger \rho_{R0} | k \rangle \tag{221}$$

e

$$Tr_R \left\{ R \rho_{R0} \right\} = \sum_k \langle k | R \rho_{R0} | k \rangle. \tag{222}$$

Trabalhando a Eq. (221), sendo $\rho_{R0} = \sum_i p_i |i\rangle \langle i|$ um operador densidade inicial do reservatório escrito na base $|i\rangle$, temos

$$\begin{aligned}
Tr_R \left\{ R^\dagger \rho_{R0} \right\} & = \sum_k \sum_i p_i \langle k | R^\dagger | i \rangle \langle i | | k \rangle \\
& = \sum_k \sum_i p_i \langle k | R^\dagger | i \rangle \delta_{ik} \\
& = \sum_k p_k \langle k | R^\dagger | k \rangle,
\end{aligned} \tag{223}$$

que para qualquer $|k\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$ e $R^\dagger = \sum_i tr_i^\dagger$, onde t é o parâmetro de acoplamento do reservatório, podemos ver que

$$Tr_R \left\{ R^\dagger \rho_{R0} \right\} = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots} \sum_i p_{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots} t \langle n_1, n_2, \dots, n_i, \dots | r_i^\dagger | n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle, \tag{224}$$

uma vez que $r_i^\dagger |n_1, n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_{i+1}, \dots\rangle$, temos

$$Tr_R \{R^\dagger \rho_{R0}\} = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots} \sum_i p_{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots} t \langle n_1, n_2, \dots, n_i, \dots | n_1, n_2, \dots, n_{i+1}, \dots \rangle, \quad (225)$$

pela relação de ortogonalidade $\langle n_i | n_{i+1} \rangle = 0$, assim

$$Tr_R \{R^\dagger \rho_{R0}\} = 0, \quad (226)$$

Analogamente, para Eq. (222) temos

$$\begin{aligned} Tr_R \{R \rho_{R0}\} &= \sum_k \sum_i p_i \langle k | R | i \rangle \langle i | | k \rangle \\ &= \sum_k \sum_i p_i \langle k | R | i \rangle \delta_{ik} \\ &= \sum_k p_k \langle k | R | k \rangle, \end{aligned} \quad (227)$$

para $R = \sum_i tr_i$ temos

$$Tr_R \{R \rho_{R0}\} = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots} \sum_i p_{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots} t \langle n_1, n_2, \dots, n_i, \dots | r_i | n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle \quad (228)$$

sendo $r_i |n_1, n_2, \dots, n_i\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_{i-1}, \dots\rangle$, então

$$Tr_R \{R \rho_{R0}\} = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots} \sum_i p_{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots} t \langle n_1, n_2, \dots, n_i, \dots | n_1, n_2, \dots, n_{i-1}, \dots \rangle \quad (229)$$

pela relação de ortogonalidade $\langle n_i | n_{i-1} \rangle = 0$, então

$$Tr_R \{R \rho_{R0}\} = 0, \quad (230)$$

vimos que os traços da Eq. (220) vão a zero, então, podemos concluir que

$$Tr_R \{[\tilde{V}(t), \tilde{\rho}(0)]\} = 0, \quad (231)$$

dessa forma, a Eq. (208) fica

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}_S(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t Tr_R \{[\tilde{V}(t), [\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}(t')]]\} dt', \quad (232)$$

que, para uma dinâmica rápida do reservatório ou para um acoplamento fraco entre o sistema e o reservatório tal que a influência do sistema no reservatório é pequena, podemos escrever a matriz densidade em tempo t' como

$$\tilde{\rho}(t') = \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0), \quad (233)$$

assim, a equação do movimento para a matriz densidade do sistema reduzido fica

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}_S(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t Tr_R \{[\tilde{V}(t), [\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0)]]\} dt', \quad (234)$$

que é conhecida como a **equação mestra de Redfield**⁴.

Assumindo que a escala do tempo de decaimento para reservatório τ_R é muito mais curta que a escala do tempo da dinâmica do sistema τ_S ($\tau_R \ll \tau_S$), podemos expandir a integral ao infinito sem que mude o resultado, assim, a equação (234) torna

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_S(t) = - \int_0^{+\infty} Tr_R \left\{ \left[\tilde{V}(t), \left[\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0) \right] \right] \right\} dt', \quad (235)$$

que é conhecida como **equação mestra de Born - Markov**, onde fizemos $\hbar = 1$.

Para o Hamiltoniano na representação de interação definido como

$$\tilde{V} = (\tilde{S} \otimes \tilde{R}^\dagger + \tilde{S}^\dagger \otimes \tilde{R}), \quad (236)$$

cuja a dependência temporal é dada por

$$\tilde{V}(t) = (\tilde{S}(t) \otimes \tilde{R}^\dagger(t) + \tilde{S}^\dagger(t) \otimes \tilde{R}(t)) \quad (237)$$

onde $\tilde{S}(t)$ é o operador que atua apenas no sistema S e $\tilde{R}(t)$ é o operador que atua apenas no reservatório. O comutador da Eq. (235) fica

$$\begin{aligned} \left[\tilde{V}(t), \left[\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0) \right] \right] &= \tilde{V}(t) \left[\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0) \right] - \left[\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0) \right] \tilde{V}(t) \\ &= \tilde{V}(t) \tilde{V}(t') (\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0)) - \tilde{V}(t) (\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0)) \tilde{V}(t') \\ &\quad - \tilde{V}(t') (\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0)) \tilde{V}(t) + (\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0)) \tilde{V}(t') \tilde{V}(t), \end{aligned} \quad (238)$$

pela Eq. (237) fica⁵

$$\begin{aligned} \left[\tilde{V}(t), \left[\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}_S(t) \tilde{\rho}_R(0) \right] \right] &= (\tilde{S}(t) \tilde{R}^\dagger(t) + \tilde{S}^\dagger(t) \tilde{R}(t)) (\tilde{S}(t') \tilde{R}^\dagger(t') + \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{R}(t')) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{\rho}_R(0) \\ &\quad - (\tilde{S}(t) \tilde{R}^\dagger(t) + \tilde{S}^\dagger(t) \tilde{R}(t)) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{\rho}_R(0) (\tilde{S}(t') \tilde{R}^\dagger(t') + \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{R}(t')) \\ &\quad - (\tilde{S}(t') \tilde{R}^\dagger(t') + \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{R}(t')) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{\rho}_R(0) (\tilde{S}(t) \tilde{R}^\dagger(t) + \tilde{S}^\dagger(t) \tilde{R}(t)) \\ &\quad + \tilde{\rho}_S(t) \tilde{\rho}_R(0) (\tilde{S}(t') \tilde{R}^\dagger(t') + \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{R}(t')) (\tilde{S}(t) \tilde{R}^\dagger(t) + \tilde{S}^\dagger(t) \tilde{R}(t)), \end{aligned} \quad (239)$$

lembrando que a distributiva entre os termos pode ser escrita como

$$(\tilde{S}(t) \otimes \tilde{R}^\dagger(t)) (\tilde{S}(t') \otimes \tilde{R}^\dagger(t')) (\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0)) = \tilde{S}(t) \tilde{S}(t') \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{R}^\dagger(t) \tilde{R}^\dagger(t') \tilde{\rho}_R(0), \quad (240)$$

assim, fazendo a distributiva de todos os termos, temos

$$\left[\tilde{V}(t), \left[\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0) \right] \right] = \tilde{S}(t) \tilde{S}(t') \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{R}^\dagger(t) \tilde{R}^\dagger(t') \tilde{\rho}_R(0)$$

⁴ A equação de Redfield é local no tempo, mas não é uma equação mestra Markoviana desde que a evolução da matriz densidade reduzida ainda depende de uma escolha explícita da preparação inicial em tempo $t = 0$ (BREUER; PETRUCCIONE et al., 2002).

⁵ Omitimos \otimes pela simplicidade.

$$\begin{aligned}
& + \tilde{S}(t)\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{R}^\dagger(t)\tilde{R}(t')\tilde{\rho}_R(0) \\
& + \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{S}(t')\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{R}(t)\tilde{R}^\dagger(t')\tilde{\rho}_R(0) \\
& + \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{R}(t)\tilde{R}(t')\tilde{\rho}_R(0) \\
& - \tilde{S}(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t') \otimes \tilde{R}^\dagger(t)\tilde{\rho}_R(0)\tilde{R}^\dagger(t') \\
& - \tilde{S}(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t') \otimes \tilde{R}^\dagger(t)\tilde{\rho}_R(0)\tilde{R}(t') \\
& - \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t') \otimes \tilde{R}(t)\tilde{\rho}_R(0)\tilde{R}^\dagger(t') \\
& - \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t') \otimes \tilde{R}(t)\tilde{\rho}_R(0)\tilde{R}(t') \\
& - \tilde{S}(t')\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t) \otimes \tilde{R}^\dagger(t')\tilde{\rho}_R(0)\tilde{R}^\dagger(t) \\
& - \tilde{S}(t')\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t) \otimes \tilde{R}^\dagger(t')\tilde{\rho}_R(0)\tilde{R}(t) \\
& - \tilde{S}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t) \otimes \tilde{R}(t')\tilde{\rho}_R(0)\tilde{R}^\dagger(t) \\
& - \tilde{S}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t) \otimes \tilde{R}(t')\tilde{\rho}_R(0)\tilde{R}(t) \\
& + \tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t')\tilde{S}(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0)\tilde{R}^\dagger(t')\tilde{R}^\dagger(t) \\
& + \tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t')\tilde{S}^\dagger(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0)\tilde{R}^\dagger(t')\tilde{R}(t) \\
& + \tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{S}(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0)\tilde{R}(t')\tilde{R}^\dagger(t) \\
& + \tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t)\tilde{S}^\dagger(t') \otimes \tilde{\rho}_R(0)\tilde{R}(t')\tilde{R}(t), \quad (241)
\end{aligned}$$

aplicando o traço parcial sobre os graus de liberdade do reservatório, e levando em conta a propriedade cíclica do traço, temos

$$\begin{aligned}
Tr_R \left\{ \left[\tilde{V}(t), \left[\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0) \right] \right] \right\} & = \tilde{S}(t)\tilde{S}(t')\tilde{\rho}_S(t)Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t)\tilde{R}^\dagger(t')\tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
& + \tilde{S}(t)\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t)Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t)\tilde{R}(t')\tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
& + \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{S}(t')\tilde{\rho}_S(t)Tr_R \left\{ \tilde{R}(t)\tilde{R}^\dagger(t')\tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
& + \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t)Tr_R \left\{ \tilde{R}(t)\tilde{R}(t')\tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
& - \tilde{S}(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t')Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t')\tilde{R}^\dagger(t)\tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
& - \tilde{S}(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t')Tr_R \left\{ \tilde{R}(t')\tilde{R}^\dagger(t)\tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
& - \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t')Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t')\tilde{R}(t)\tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
& - \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t')Tr_R \left\{ \tilde{R}(t')\tilde{R}(t)\tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
& - \tilde{S}(t')\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t)Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t)\tilde{R}^\dagger(t')\tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
& - \tilde{S}(t')\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t)Tr_R \left\{ \tilde{R}(t)\tilde{R}^\dagger(t')\tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
& - \tilde{S}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t)Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t)\tilde{R}(t')\tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
& - \tilde{S}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t)Tr_R \left\{ \tilde{R}(t)\tilde{R}(t')\tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
& + \tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t')\tilde{S}(t)Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t')\tilde{R}^\dagger(t)\tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
& + \tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t')\tilde{S}^\dagger(t)Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t')\tilde{R}(t)\tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
& + \tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{S}(t)Tr_R \left\{ \tilde{R}(t')\tilde{R}^\dagger(t)\tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
& + \tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t)\tilde{S}^\dagger(t')Tr_R \left\{ \tilde{R}(t')\tilde{R}(t)\tilde{\rho}_R(0) \right\} \quad (242)
\end{aligned}$$

como vimos durante a demonstração da equação (231), os termos $Tr_R \left\{ \tilde{R}(t) \tilde{R}(t') \tilde{\rho}_R(0) \right\} = Tr_R \left\{ \tilde{R}(t') \tilde{R}(t) \tilde{\rho}_R(0) \right\} = Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t) \tilde{R}^\dagger(t') \tilde{\rho}_R(0) \right\} = Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t') \tilde{R}^\dagger(t) \tilde{\rho}_R(0) \right\} = 0$ para qualquer t e t' , assim a Eq. (242) fica

$$\begin{aligned}
Tr_R \left\{ \left[\tilde{V}(t), \left[\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0) \right] \right] \right\} &= \tilde{S}(t) \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{\rho}_S(t) Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t) \tilde{R}(t') \tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
&+ \tilde{S}^\dagger(t) \tilde{S}(t') \tilde{\rho}_S(t) Tr_R \left\{ \tilde{R}(t) \tilde{R}^\dagger(t') \tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
&- \tilde{S}(t) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t') Tr_R \left\{ \tilde{R}(t') \tilde{R}^\dagger(t) \tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
&- \tilde{S}^\dagger(t) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}(t') Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t') \tilde{R}(t) \tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
&- \tilde{S}(t') \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t) Tr_R \left\{ \tilde{R}(t) \tilde{R}^\dagger(t') \tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
&- \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}(t) Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t) \tilde{R}(t') \tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
&+ \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}(t') \tilde{S}^\dagger(t) Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t') \tilde{R}(t) \tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
&+ \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{S}(t) Tr_R \left\{ \tilde{R}(t') \tilde{R}^\dagger(t) \tilde{\rho}_R(0) \right\},
\end{aligned} \tag{243}$$

juntando os termos semelhantes temos⁶

$$\begin{aligned}
Tr_R \left\{ \left[\tilde{V}(t), \left[\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}_S(t) \tilde{\rho}_R(0) \right] \right] \right\} &= \left[\tilde{S}(t) \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}(t) \right] Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t) \tilde{R}(t') \tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
&+ \left[\tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{S}(t) - \tilde{S}(t) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t') \right] Tr_R \left\{ \tilde{R}(t') \tilde{R}^\dagger(t) \tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
&+ \left[\tilde{S}^\dagger(t) \tilde{S}(t') \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{S}(t') \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t) \right] Tr_R \left\{ \tilde{R}(t) \tilde{R}^\dagger(t') \tilde{\rho}_R(0) \right\} \\
&+ \left[\tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}(t') \tilde{S}^\dagger(t) - \tilde{S}^\dagger(t) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}(t') \right] Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t') \tilde{R}(t) \tilde{\rho}_R(0) \right\}.
\end{aligned} \tag{244}$$

Vamos definir o operador do reservatório como

$$\tilde{R}(t) = \sum_k g_k \tilde{c}_k(t), \tag{245}$$

onde g_k é o parâmetro de acoplamento do reservatório e $\tilde{c}_k(t)$ é o operador de aniquilação na representação de interação dado por

$$\tilde{c}_k(t) = e^{iH_R t} c_k e^{-iH_R t}, \tag{246}$$

onde c_k é o operador de aniquilação na representação de Schrödinger e H_R é o Hamiltoniano do reservatório dado por

$$H_R = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k, \tag{247}$$

onde c_k^\dagger é o operador de criação e ϵ_k é a energia de partícula livre. Pelo método da expansão de Baker-Hausdorff (BASSALO; CATTANI, 2012)

$$e^{iG\lambda} A e^{-iG\lambda} = A + i\lambda [G, A] + \frac{(i\lambda)^2}{2!} [G, [G, A]] + \dots, \tag{248}$$

⁶ $\tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_R(0) = \tilde{\rho}_S(t) \tilde{\rho}_R(0)$.

podemos ver que

$$e^{iH_R t} c_k e^{-iH_R t} = c_k + it[H_R, c_k] + \frac{(it)^2}{2!} [H_R, [H_R, c_k]] + \dots, \quad (249)$$

pela Eq. (247), podemos calcular a relação de comutação da seguinte forma:

$$\begin{aligned} [H_R, c_{k'}] &= \sum_k \epsilon_k [c_k^\dagger c_k, c_{k'}] \\ &= \sum_k \epsilon_k (c_k^\dagger c_k c_{k'} - c_{k'} c_k^\dagger c_k), \end{aligned} \quad (250)$$

lembrando que, para férmions, a relação de anticomutação de um operador por si mesmo é dada por

$$\{c_k, c_{k'}\} = c_k c_{k'} + c_{k'} c_k = 0, \quad (251)$$

tal que

$$c_k c_{k'} = -c_{k'} c_k, \quad (252)$$

lembrando também que a relação de anticomutação de um operador por seu conjugado hermitiano é dada por

$$\{c_{k'}, c_k^\dagger\} = c_{k'} c_k^\dagger + c_k^\dagger c_{k'} = \delta_{kk'}, \quad (253)$$

tal que

$$c_{k'} c_k^\dagger = \delta_{kk'} - c_k^\dagger c_{k'}, \quad (254)$$

então, substituindo as Eqs. (252) e (254) em (250) temos

$$\begin{aligned} [H_R, c_{k'}] &= \sum_k \epsilon_k (-c_k^\dagger c_{k'} c_k - \delta_{kk'} c_k + c_k^\dagger c_{k'} c_k) \\ &= -\sum_k \epsilon_k \delta_{kk'} c_k, \end{aligned} \quad (255)$$

pela Eq. (17), para $k = k'$, temos

$$[H_R, c_k] = -\sum_k \epsilon_k c_k \quad (256)$$

de modo que substituída em Eq. (249) temos

$$\begin{aligned} e^{iH_R t} c_k e^{-iH_R t} &= c_k + (-it\epsilon_k c_k) + \left(-\frac{(it)^2}{2!} \epsilon_k^2 c_k\right) + \dots \\ &= c_k \left[1 + (-it\epsilon_k) + \left(-\frac{(it)^2}{2!} \epsilon_k^2\right) + \dots\right] \\ &= c_k e^{-i\epsilon_k t}, \end{aligned} \quad (257)$$

logo,

$$\tilde{c}_k(t) = c_k e^{-i\epsilon_k t}, \quad (258)$$

consequentemente

$$\tilde{R}(t) = \sum_k g_k c_k e^{-i\epsilon_k t}. \quad (259)$$

Utilizando o resultado da Eq. (259), podemos calcular os traços da Eq. (244) como:

$$\begin{aligned} Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t) \tilde{R}(t') \tilde{\rho}_R(0) \right\} &= Tr_R \left\{ \sum_k g_k^* c_k^\dagger e^{i\epsilon_k t} \sum_{k'} g_{k'} c_{k'} e^{-i\epsilon_{k'} t'} \tilde{\rho}_R(0) \right\} \\ &= Tr_R \left\{ \sum_{k,k'} g_k^* g_{k'} e^{i\epsilon_k t} e^{-i\epsilon_{k'} t'} c_k^\dagger c_{k'} \tilde{\rho}_R(0) \right\}, \end{aligned} \quad (260)$$

seja $|k\rangle$ uma base de estado do reservatório tal que $\delta_{k,k'} = \langle k|k'\rangle$ cuja definição é dada pela Eq. (17) temos

$$\begin{aligned} Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t) \tilde{R}(t') \tilde{\rho}_R(0) \right\} &= Tr_R \left\{ \sum_{k,k'} g_k^* g_{k'} e^{i\epsilon_k t} e^{-i\epsilon_{k'} t'} c_k^\dagger c_{k'} \tilde{\rho}_R(0) \langle k|k'\rangle \right\} \\ &= Tr_R \left\{ \sum_{k,k'} g_k^* g_{k'} e^{i\epsilon_k t} e^{-i\epsilon_{k'} t'} c_k^\dagger c_{k'} \tilde{\rho}_R(0) \delta_{kk'} \right\} \\ &= Tr_R \left\{ \sum_k g_k^* g_k e^{i\epsilon_k t} e^{-i\epsilon_k t'} c_k^\dagger c_k \tilde{\rho}_R(0) \right\} \\ &= Tr_R \left\{ \sum_k |g_k|^2 e^{i\epsilon_k(t-t')} c_k^\dagger c_k \tilde{\rho}_R(0) \right\} \\ &= \sum_k |g_k|^2 e^{i\epsilon_k(t-t')} Tr_R \left\{ c_k^\dagger c_k \tilde{\rho}_R(0) \right\}, \end{aligned} \quad (261)$$

pela Eq. (3), temos

$$\langle c_k^\dagger c_k \rangle = Tr_R \left\{ c_k^\dagger c_k \tilde{\rho}_R(0) \right\} = \langle n_k \rangle, \quad (262)$$

com $n_k = c_k^\dagger c_k$, então

$$Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t) \tilde{R}(t') \tilde{\rho}_R(0) \right\} = \sum_k |g_k|^2 e^{i\omega_k(t-t')} \langle n_k \rangle, \quad (263)$$

onde $\langle n_k \rangle$ é o número médio de ocupação. Lembrando que na estatística de férmions os números médios de ocupação em um sistema é

$$\langle n_k \rangle = f(\epsilon_k) \quad (264)$$

onde

$$f(\epsilon_k) = \left(e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1 \right)^{-1}, \quad (265)$$

é a função de Fermi, com $\beta = \frac{1}{k_B T}$, uma função de temperatura (k_B , constante de Boltzmann) e μ , potencial químico, então

$$Tr_R \left\{ \tilde{R}^\dagger(t) \tilde{R}(t') \tilde{\rho}_R(0) \right\} = \sum_k |g_k|^2 e^{i\omega_k(t-t')} f(\epsilon_k), \quad (266)$$

analogamente, podemos ver que

$$Tr_R \left\{ R^\dagger(t') R(t) \tilde{\rho}_R(0) \right\} = \sum_k |g_k|^2 e^{-i\omega_k(t-t')} f(\epsilon_k). \quad (267)$$

Podemos calcular também

$$\begin{aligned} Tr_R \{R(t)R^\dagger(t')\tilde{\rho}_R(0)\} &= Tr_R \left\{ \sum_k g_k c_k e^{-i\epsilon_k t} \sum_{k'} g_{k'}^* c_{k'}^\dagger e^{i\epsilon_{k'} t'} \tilde{\rho}_R(0) \right\} \\ &= \sum_k |g_k|^2 e^{-i\epsilon_k(t-t')} Tr \{c_k c_k^\dagger \tilde{\rho}_R(0)\}, \end{aligned} \quad (268)$$

fazendo $c_k c_k^\dagger = 1 - c_k^\dagger c_k$ de modo que

$$\begin{aligned} Tr_R \{R(t)R^\dagger(t')\tilde{\rho}_R(0)\} &= \sum_k |g_k|^2 e^{-i\epsilon_k(t-t')} Tr_R \{(1 - c_k^\dagger c_k)\tilde{\rho}_R(0)\} \\ &= \sum_k |g_k|^2 e^{-i\epsilon_k(t-t')} \left(Tr_R \{\tilde{\rho}_R(0)\} - Tr_R \{c_k^\dagger c_k \tilde{\rho}_R(0)\} \right), \end{aligned} \quad (269)$$

mas

$$\begin{aligned} Tr_R \{\tilde{\rho}_R(0)\} &= Tr_R \{e^{iH_R t} \rho_R(0) e^{-iH_R t}\} \\ &= Tr_R \{e^{iH_R t} e^{-iH_R t} \rho_R(0)\} \\ &= Tr_R \{\rho_R(0)\}, \end{aligned} \quad (270)$$

pela Eq. (5)

$$Tr_R \{\tilde{\rho}_R(0)\} = Tr_R \{\rho_R(0)\} = 1, \quad (271)$$

então a Eq. (269) torna

$$Tr_R \{R(t)R^\dagger(t')\tilde{\rho}_R(0)\} = \sum_k |g_k|^2 e^{-i\epsilon_k(t-t')} (1 - f(\epsilon_k)), \quad (272)$$

analogamente, podemos ver também que

$$Tr_R \{R(t')R^\dagger(t)\tilde{\rho}_R(0)\} = \sum_k |g_k|^2 e^{i\epsilon_k(t-t')} (1 - f(\epsilon_k)), \quad (273)$$

assim, a Eq. (244) fica

$$\begin{aligned} Tr_R \{[\tilde{V}(t), [\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}_S(t)\tilde{\rho}_R(0)]]\} &= [\tilde{S}(t)\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t) - \tilde{S}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t)] \sum_k |g_k|^2 e^{i\epsilon_k(t-t')} f(\epsilon_k) \\ &+ [\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{S}(t) - \tilde{S}(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t')] \sum_k |g_k|^2 e^{i\epsilon_k(t-t')} (1 - f(\epsilon_k)) \\ &+ [\tilde{S}^\dagger(t)\tilde{S}(t')\tilde{\rho}_S(t) - \tilde{S}(t')\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t)] \sum_k |g_k|^2 e^{-i\epsilon_k(t-t')} (1 - f(\epsilon_k)) \\ &+ [\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t')\tilde{S}^\dagger(t) - \tilde{S}^\dagger(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t')] \sum_k |g_k|^2 e^{-i\epsilon_k(t-t')} f(\epsilon_k), \end{aligned} \quad (274)$$

substituindo o somatório em k por uma integral de frequências contínuas de densidade de estado, $J(\epsilon)$, isto é, fazendo

$$\sum_k |g_k|^2 = g \int_0^{+\infty} J(\epsilon) d\epsilon, \quad (275)$$

temos

$$\begin{aligned}
Tr_R \left\{ \left[\tilde{V}(t), \left[\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}_S(t) \tilde{\rho}_R(0) \right] \right] \right\} &= g \left[\tilde{S}(t) \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}(t) \right] \\
&\quad \int_0^{+\infty} f(\epsilon) J(\epsilon) e^{i\epsilon(t-t')} d\epsilon \\
&+ g \left[\tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{S}(t) - \tilde{S}(t) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t') \right] \\
&\quad \int_0^{+\infty} (1 - f(\epsilon)) J(\epsilon) e^{i\epsilon(t-t')} d\epsilon \\
&+ g \left[\tilde{S}^\dagger(t) \tilde{S}(t') \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{S}(t') \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t) \right] \\
&\quad \int_0^{+\infty} (1 - f(\epsilon)) J(\epsilon) e^{-i\epsilon(t-t')} d\epsilon \\
&+ g \left[\tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}(t') \tilde{S}^\dagger(t) - \tilde{S}^\dagger(t) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}(t') \right] \\
&\quad \int_0^{+\infty} f(\epsilon) J(\epsilon) e^{-i\epsilon(t-t')} d\epsilon,
\end{aligned} \tag{276}$$

para uma densidade de estado constante ($J(\epsilon) = J_0$) temos

$$\begin{aligned}
Tr_R \left\{ \left[\tilde{V}(t), \left[\tilde{V}(t'), \tilde{\rho}_S(t) \tilde{\rho}_R(0) \right] \right] \right\} &= gJ_0 \left[\tilde{S}(t) \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}(t) \right] \\
&\quad \int_0^{+\infty} f(\epsilon) e^{i\epsilon(t-t')} d\epsilon \\
&+ gJ_0 \left[\tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{S}(t) - \tilde{S}(t) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t') \right] \\
&\quad \int_0^{+\infty} (1 - f(\epsilon)) e^{i\epsilon(t-t')} d\epsilon \\
&+ gJ_0 \left[\tilde{S}^\dagger(t) \tilde{S}(t') \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{S}(t') \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t) \right] \\
&\quad \int_0^{+\infty} (1 - f(\epsilon)) e^{-i\epsilon(t-t')} d\epsilon \\
&+ gJ_0 \left[\tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}(t') \tilde{S}^\dagger(t) - \tilde{S}^\dagger(t) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}(t') \right] \\
&\quad \int_0^{+\infty} f(\epsilon) e^{-i\epsilon(t-t')} d\epsilon,
\end{aligned} \tag{277}$$

substituir Eq.(277) em (235) temos

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \tilde{\rho}_S(t) &= -gJ_0 \int_0^{+\infty} \left[\tilde{S}(t) \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}(t) \right] dt' \int_0^{+\infty} f(\epsilon) e^{i\epsilon(t-t')} d\epsilon \\
&- gJ_0 \int_0^{+\infty} \left[\tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t') \tilde{S}(t) - \tilde{S}(t) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t') \right] dt' \int_0^{+\infty} (1 - f(\epsilon)) e^{i\epsilon(t-t')} d\epsilon \\
&- gJ_0 \int_0^{+\infty} \left[\tilde{S}^\dagger(t) \tilde{S}(t') \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{S}(t') \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t) \right] dt' \int_0^{+\infty} (1 - f(\epsilon)) e^{-i\epsilon(t-t')} d\epsilon \\
&- gJ_0 \int_0^{+\infty} \left[\tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}(t') \tilde{S}^\dagger(t) - \tilde{S}^\dagger(t) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}(t') \right] dt' \int_0^{+\infty} f(\epsilon) e^{-i\epsilon(t-t')} d\epsilon,
\end{aligned} \tag{278}$$

pela positividade da função $e^{i\epsilon(t-t')}$, podemos escrever

$$\int_0^{+\infty} e^{i\epsilon(t-t')} d\epsilon = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\epsilon(t-t')} d\epsilon \tag{279}$$

então

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_S(t) &= -gJ_0\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\tilde{S}(t)\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t)-\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t)\right]dt'\int_0^{+\infty}f(\epsilon)e^{i\epsilon(t-t')}d\epsilon \\
&- gJ_0\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{S}(t)-\tilde{S}(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t')\right]dt'\int_0^{+\infty}(1-f(\epsilon))e^{i\epsilon(t-t')}d\epsilon \\
&- gJ_0\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\tilde{S}^\dagger(t)\tilde{S}(t')\tilde{\rho}_S(t)-\tilde{S}(t')\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t)\right]dt'\int_0^{+\infty}(1-f(\epsilon))e^{-i\epsilon(t-t')}d\epsilon \\
&- gJ_0\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t')\tilde{S}^\dagger(t)-\tilde{S}^\dagger(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t')\right]dt'\int_0^{+\infty}f(\epsilon)e^{-i\epsilon(t-t')}d\epsilon,
\end{aligned} \tag{280}$$

mas,

$$\pi\delta(t-t')=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i\epsilon(t-t')}d\epsilon, \tag{281}$$

então,

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_S(t) &= -gJ_0\pi f(\epsilon)\int_0^{+\infty}\left[\tilde{S}(t)\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t)-\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t)\right]\delta(t-t')dt' \\
&- gJ_0\pi(1-f(\epsilon))\int_0^{+\infty}\left[\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t')\tilde{S}(t)-\tilde{S}(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t')\right]\delta(t-t')dt' \\
&- gJ_0\pi(1-f(\epsilon))\int_0^{+\infty}\left[\tilde{S}^\dagger(t)\tilde{S}(t')\tilde{\rho}_S(t)-\tilde{S}(t')\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t)\right]\delta(t'-t)dt' \\
&- gJ_0\pi f(\epsilon)\int_0^{+\infty}\left[\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t')\tilde{S}^\dagger(t)-\tilde{S}^\dagger(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t')\right]\delta(t'-t)dt',
\end{aligned} \tag{282}$$

pela propriedade de filtração, para qualquer $t=t'$,

$$\int_0^{+\infty}\delta(t-t')f(t')dt'=f(t), \tag{283}$$

então,

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_S(t) &= -gJ_0\pi\left[\tilde{S}(t)\tilde{S}^\dagger(t)\tilde{\rho}_S(t)-\tilde{S}^\dagger(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t)\right]f(\epsilon) \\
&- gJ_0\pi\left[\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t)\tilde{S}(t)-\tilde{S}(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t)\right](1-f(\epsilon)) \\
&- gJ_0\pi\left[\tilde{S}^\dagger(t)\tilde{S}(t)\tilde{\rho}_S(t)-\tilde{S}(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}^\dagger(t)\right](1-f(\epsilon)) \\
&- gJ_0\pi\left[\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t)\tilde{S}^\dagger(t)-\tilde{S}^\dagger(t)\tilde{\rho}_S(t)\tilde{S}(t)\right]f(\epsilon).
\end{aligned} \tag{284}$$

Quando $t\rightarrow 0^7$, $f(\epsilon)$ tende à função degrau⁸ (ou função teta), $\Theta(\mu-\epsilon)$, dada por

$$f(\epsilon)\rightarrow\Theta(\mu-\epsilon)=\begin{cases} 1, & \text{para } \epsilon<\mu(0,v) \\ 0, & \text{para } \epsilon>\mu(0,v) \end{cases}, \tag{285}$$

⁷ Significa que o sistema passa para o estado de energia mais baixa. Como o princípio de Pauli é válido para fermiões, cada nível individual mais baixa encontra-se ocupado por uma única partícula (FLIESSBACH; JR, 2000).

⁸ Tipo de descontinuidade que surge quando uma função é contínua excepto por um número finito de salto.

válida no domínio de $\epsilon \geq 0$, onde $v = \frac{V}{N}$ é a densidade de volume. Então, analisando o sistema no estado de energia mais baixa, ϵ_0 , no qual o potencial químico é zero ($\mu = 0$), correspondente ao domínio $\epsilon > \mu(0, v)$ temos que

$$f(\epsilon) = 0, \quad (286)$$

logo, a Eq. (284) fica

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\rho}_S(t) &= -gJ_0\pi \left[\tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t) \tilde{S}(t) - \tilde{S}(t) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t) \right] \\ &\quad - gJ_0\pi \left[\tilde{S}^\dagger(t) \tilde{S}(t) \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{S}(t) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t) \right], \end{aligned} \quad (287)$$

chamando

$$\frac{\gamma}{2} = \pi g J_0 \quad (288)$$

desse modo, a Eq. (287) fica

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\rho}_S(t) &= -\frac{\gamma}{2} \left[\tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t) \tilde{S}(t) + \tilde{S}^\dagger(t) \tilde{S}(t) \tilde{\rho}_S(t) - \tilde{S}(t) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t) - \tilde{S}(t) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t) \right] \\ &= -\frac{\gamma}{2} \left[\tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t) \tilde{S}(t) + \tilde{S}^\dagger(t) \tilde{S}(t) \tilde{\rho}_S(t) - 2\tilde{S}(t) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t) \right] \\ &= \gamma \left[\tilde{S}(t) \tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t) - \frac{1}{2} \left(\tilde{\rho}_S(t) \tilde{S}^\dagger(t) \tilde{S}(t) + \tilde{S}^\dagger(t) \tilde{S}(t) \tilde{\rho}_S(t) \right) \right]. \end{aligned} \quad (289)$$

Podemos retornar à representação de Schrödinger desde que o operador densidade do sistema na representação de interação é dado por

$$\tilde{\rho}_S(t) = e^{iHst} \rho_S e^{-iHst}, \quad (290)$$

e o operador $\tilde{S}(t)$ é dado por

$$\tilde{S}(t) = e^{iHst} S e^{-iHst}, \quad (291)$$

que substituídas em Eq. (289) temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\rho}_S(t) &= \gamma \left[\left(e^{iHst} S e^{-iHst} \right) \left(e^{iHst} \rho_S e^{-iHst} \right) \left(e^{iHst} S^\dagger e^{-iHst} \right) \right] \\ &\quad - \frac{\gamma}{2} \left[\left(e^{iHst} \rho_S e^{-iHst} \right) \left(e^{iHst} S^\dagger e^{-iHst} \right) \left(e^{iHst} S e^{-iHst} \right) \right] \\ &\quad - \frac{\gamma}{2} \left[\left(e^{iHst} S^\dagger e^{-iHst} \right) \left(e^{iHst} S e^{-iHst} \right) \left(e^{iHst} \rho_S e^{-iHst} \right) \right] \\ &= \gamma \left[e^{iHst} S \rho_S S^\dagger e^{-iHst} - \frac{1}{2} \left(e^{iHst} \rho_S S^\dagger S e^{-iHst} + e^{iHst} S^\dagger S \rho_S e^{-iHst} \right) \right] \end{aligned} \quad (292)$$

usando a relação de anticomutação e colocando exponenciais em evidência temos

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}_S(t) = \gamma e^{iHst} \left[S \rho_S S^\dagger - \frac{1}{2} \{ S^\dagger S, \rho_S \} \right] e^{-iHst}. \quad (293)$$

Derivando a Eq. (290) podemos ver que

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_S(t) &= ie^{iH_S t} H_S \rho_S e^{-iH_S t} \\
&+ e^{iH_S t} \frac{d}{dt} \rho_S e^{-iH_S t} \\
&- ie^{iH_S t} \rho_S H_S e^{-iH_S t}, \\
&= e^{iH_S t} \frac{d}{dt} \rho_S e^{-iH_S t} + ie^{iH_S t} [H_S, \rho_S] e^{-iH_S t} \\
&= e^{iH_S t} \left\{ \frac{d}{dt} \rho_S + i [H_S, \rho_S] \right\} e^{-iH_S t}, \tag{294}
\end{aligned}$$

assim, igualando Eq. (294) com (293) temos

$$e^{iH_S t} \left\{ \frac{d}{dt} \rho_S + i [H_S, \rho_S] \right\} e^{-iH_S t} = \gamma e^{iH_S t} \left[S \rho_S S^\dagger(t) - \frac{1}{2} \{S^\dagger S, \rho_S\} \right] e^{-iH_S t}, \tag{295}$$

eliminando os termos das exponenciais e isolando $\frac{d}{dt} \rho_S$ obtemos a **equação mestra de Lindblad** dada por

$$\frac{d}{dt} \rho_S = -i [H_S, \rho_S] + \gamma \left[S \rho_S S^\dagger - \frac{1}{2} \{S^\dagger S, \rho_S\} \right], \tag{296}$$

escrito comumente na forma de operado de Lindblad como

$$\frac{d}{dt} \rho_S = -i [H_S, \rho_S] + \mathcal{L}_j \rho_S \tag{297}$$

onde \mathcal{L}_j são os superoperadores que atuam no estado ρ_S dado por

$$\mathcal{L}_j \rho_S = L_j \rho_S L_j^\dagger - \frac{1}{2} L_j^\dagger L_j \rho_S - \frac{1}{2} \rho_S L_j^\dagger L_j \tag{298}$$

com L_j sendo operadores de Lindblad.

O primeiro termo direita da equação (296) é o termo da equação de Liouville - von Neumann útil para sistemas fechados, já o segundo é o termo de Lindblad e aparece quando tomamos o traço parcial de graus de liberdade do reservatório.

Em resumo, a equação mestra é usada para estudar e avaliar evolução não unitária do sistema quântico, sistemas cuja evolução inclui processo de incoerência tal como relaxamento (ou decaimento) e defasamento, e são úteis na descrição de sistemas com dissipação causada pela interação do sistema com o ambiente.

É importante enfatizar algumas aproximações importantes exigidas para derivação da equação mestra de Lindblad (NATION; JOHANSSON, 2011):

1. **Separabilidade:** Em $t = 0$ não há correlação entre o sistema e o ambiente tal que a matriz densidade total possa ser escrita como um produto tensorial $\rho_{tot}(0) = \rho(0) \otimes \rho_R(0)$.
2. **Aproximação de Born:** Exige que o estado do ambiente não muda significativamente como resultado de interação com o sistema; que o sistema e o ambiente permanecem separável durante a evolução $\rho_{tot} = \rho(t) \otimes \rho_R$.

3. **Aproximação de Markov:** A escala de tempo de decaimento para o reservatório τ_R é mais curta que a menor escala de tempo da dinâmica do sistema $\tau_S \gg \tau_R$.

Anexos

Código da simulação experimental

Segue em anexo o código de simulação experimental que usamos para calcular a dinâmica quântica do sistema de acoplamento entre o ponto quântico com o reservatório. Nele, o leitor pode seguir o procedimento computacional que usamos para simular o nosso sistema. Os principais resultados se encontram na primeira tabela. A segunda tabela mostra os valores de coeficiente de determinação (*score*), R^2 .

In [1]:

```
#Quantum dynamics and detection simulation for a single spin in a quantum dot attached to ferromagnetic Leads
#Fabricio M. Souza and Midana Baial Sambú, 2022
```

In [1]:

```
import numpy as np
import pandas as pd
from qutip import *
import matplotlib.pyplot as plt
from collections import Counter
from scipy import integrate
from sklearn.linear_model import LinearRegression
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
plt.rcParams.update({'font.size': 20})
```

THE OPERATORS

In [2]:

```
#operators z-direction:
dup = tensor(sigmam(), qeye(2))
ddw = -tensor(sigmaz(), sigmam())
dupd = dup.dag()
ddwd = ddw.dag()
nup = dupd*dup # number of particle in state
ndw = ddwd*ddw
ntotal = nup+ndw # total sum of states
Mz = nup-ndw # magnetization
#operators x-direction:
dyp = (dup-ddw)/np.sqrt(2)
dxm = (dup+ddw)/np.sqrt(2)
dypd = dyp.dag()
dxmd = dxm.dag()
nxp = dypd*dyp
nxm = dxmd*dxm
ntotalx = nxp + nxm
Mx = nxp-nxm
#operators y-direction:
dyp = (dup-1j*ddw)/np.sqrt(2)
dym = (dup+1j*ddw)/np.sqrt(2)
dypd = dyp.dag()
dymd = dym.dag()
nyp = dypd*dyp
nym = dymd*dym
ntotaly = nyp + nym
My = nyp-nym
```

PARAMETERS OF SIMULATION

In [3]:

```
#parameters:
thetaB = 0 # transversal magnetic fiel in x-direction
omega = 1
Gamma0 = 0.1
NT = 200
tmax = 2
L = 1e5
Repetitions = 50000
times = np.linspace(0, tmax, NT)
detection_times_list = np.append(times, tmax+tmax/NT)
deltat = tmax / NT
```

THE HAMILTONIAN

In [4]:

```
#hamiltonian:
h = ((omega/2)*((np.cos(thetaB)-1j*np.sin(thetaB))*dupd*ddw+(np.cos(thetaB)+1j*np.sin(thetaB))*ddwd*dup))
```

COMPUATIONAL BASIS OF THE SYSTEM

In [5]:

```
# computational basis:
b00 = tensor(basis(2,0), basis(2,0))
b01 = tensor(basis(2,0), basis(2,1))
b10 = tensor(basis(2,1), basis(2,0))
b11 = tensor(basis(2,1), basis(2,1))
```

INITIAL STATE

In [6]:

```
#initial state:
psi0 = b01
```

COLLAPSE OPERATORS

In [7]:

```
#collapse operators:
Czp = np.sqrt((Gamma0/omega)*2*np.pi)*dup
Czm = np.sqrt((Gamma0/omega)*2*np.pi)*ddw
Cxp=np.sqrt((Gamma0/omega)*2*np.pi)*dpx
Cxm=np.sqrt((Gamma0/omega)*2*np.pi)*dxm
Cyp=np.sqrt((Gamma0/omega)*2*np.pi)*dyp
Cym=np.sqrt((Gamma0/omega)*2*np.pi)*dym
```

THE CALCULE OF THE EVOLUTION OF SYSTEM

STATES

In [8]:

```
# Calculing evolution of system
opts = Options(store_states = True) #keep the whole density matrix
evolution = mesolve((h/omega)*2*np.pi, psi0, times, [Czp, Czm, Cxp, Cxm, Cyp, Cym], [nup, ndw, nxp, nxm, nyp, nym], options=opts)
psis = evolution.states
avegs = {
    'nup': evolution.expect[0],
    'ndw': evolution.expect[1],
    'nxp': evolution.expect[2],
    'nxm': evolution.expect[3],
    'nyp': evolution.expect[4],
    'nym': evolution.expect[5],
}
```

In [9]:

```
print('Estado 1', psis[0])
print('Estado 2', psis[1])
print('Estado 3', psis[2])
print('Estado 4', psis[3])
print('Estado 5', psis[4])
print('Estado 6', psis[5])
```

Estado 1 Quantum object: dims = [[2, 2], [2, 2]], shape = (4, 4), type = oper, isherm = True

Qobj data =

```
[[0. 0. 0. 0.]
 [0. 1. 0. 0.]
 [0. 0. 0. 0.]
 [0. 0. 0. 0.]]
```

Estado 2 Quantum object: dims = [[2, 2], [2, 2]], shape = (4, 4), type = oper, isherm = True

Qobj data =

```
[[0.00000000e+00+0.j      0.00000000e+00+0.j
  0.00000000e+00+0.j      0.00000000e+00+0.j      ]
 [0.00000000e+00+0.j      9.80256171e-01+0.j
  0.00000000e+00+0.03096071j 0.00000000e+00+0.j      ]
 [0.00000000e+00+0.j      0.00000000e+00-0.03096071j
  9.77867029e-04+0.j      0.00000000e+00+0.j      ]
 [0.00000000e+00+0.j      0.00000000e+00+0.j
  0.00000000e+00+0.j      1.87659621e-02+0.j      ]]
```

Estado 3 Quantum object: dims = [[2, 2], [2, 2]], shape = (4, 4), type = oper, isherm = True

Qobj data =

```
[[0.      +0.j      0.      +0.j      0.      +0.j
  0.      +0.j      ]
 [0.      +0.j      0.95898598+0.j      0.      +0.06063829j
  0.      +0.j      ]
 [0.      +0.j      0.      -0.06063829j 0.00383426+0.j
  0.      +0.j      ]
 [0.      +0.j      0.      +0.j      0.      +0.j
  0.03717976+0.j      ]]
```

Estado 4 Quantum object: dims = [[2, 2], [2, 2]], shape = (4, 4), type = oper, isherm = True

Qobj data =

```
[[0.      +0.j      0.      +0.j      0.      +0.j
  0.      +0.j      ]
 [0.      +0.j      0.93630086+0.j      0.      +0.08895392j
  0.      +0.j      ]
 [0.      +0.j      0.      -0.08895392j 0.00845113+0.j
  0.      +0.j      ]
 [0.      +0.j      0.      +0.j      0.      +0.j
  0.05524801+0.j      ]]
```

Estado 5 Quantum object: dims = [[2, 2], [2, 2]], shape = (4, 4), type = oper, isherm = True

Qobj data =

```
[[0.      +0.j      0.      +0.j      0.      +0.j
  0.      +0.j      ]
 [0.      +0.j      0.91231479+0.j      0.      +0.11583752j
  0.      +0.j      ]
 [0.      +0.j      0.      -0.11583752j 0.01470802+0.j
  0.      +0.j      ]
 [0.      +0.j      0.      +0.j      0.      +0.j
  0.07297719+0.j      ]]
```

Estado 6 Quantum object: dims = [[2, 2], [2, 2]], shape = (4, 4), type = oper, isherm = True

Qobj data =

```
[[0.      +0.j      0.      +0.j      0.      +0.j
  0.      +0.j      ]
 [0.      +0.j      0.88714376+0.j      0.      +0.14122771j
  0.      +0.j      ]
 [0.      +0.j      0.      -0.14122771j 0.02248258+0.j
  0.      +0.j      ]
 [0.      +0.j      0.      +0.j      0.      +0.j
  0.09037367+0.j      ]]
```

In [10]:

```
#not being used:
def aveg_calculator_from_density_matrix(operator_to_aveg, psis):
    n_aveg = []
    for i in range(0, NT):
        psii = psis[i]
        #density_matrix = ket2dm(psii) #use only in case of no collapse operators in mesolve
        density_matrix = psii
        n_aveg.append((operator_to_aveg * density_matrix).tr())
    n_aveg_round = [round(x, 5) for x in n_aveg]
    return n_aveg_round
```

Expected values of states/ Average numbers

In [11]:

```
nup_aveg = evolution.expect[0]
ndw_aveg = evolution.expect[1]
npx_aveg = evolution.expect[2]
nmx_aveg = evolution.expect[3]
nyp_aveg = evolution.expect[4]
nym_aveg = evolution.expect[5]
```

In [12]:

```
#plot figures:
#for i in avegs:
#    plt.plot(times, avegs.get(i))
#plt.bar(times, nup_aveg, 0.7, color='g')
#plt.bar(times, ndw_aveg, 0.7, color='g')
#plt.savefig(i+'.png')
#plt.clf()
#plt.show
```

EVOLUTION OF THE SYSTEM (NO COLLAPSE OPERATORS) - THEORETICAL

In [13]:

```
gamma0 = 0
#collapse operators:
Czp = np.sqrt((gamma0/omega)*2*np.pi)*dup
Czm = np.sqrt((gamma0/omega)*2*np.pi)*ddw
Cxp=np.sqrt((gamma0/omega)*2*np.pi)*dpx
Cxm=np.sqrt((gamma0/omega)*2*np.pi)*dpx
Cyp=np.sqrt((gamma0/omega)*2*np.pi)*dpy
Cym=np.sqrt((gamma0/omega)*2*np.pi)*dpy
# Calculing evolution of system
opts_off = Options(store_states = True) #keep the whole density matrix
evolution_off = mesolve((h/omega)*2*np.pi, psi0, times, [Czp, Czm, Cxp, Cxm, Cyp, Cym], [nup, ndw, npx, nmx, nyp, nym], options=opts)
psis_off = evolution_off.states
avegs_off = {
    'nup_off': evolution_off.expect[0],
    'ndw_off': evolution_off.expect[1],
    'npx_off': evolution_off.expect[2],
    'nmx_off': evolution_off.expect[3],
    'nyp_off': evolution_off.expect[4],
    'nym_off': evolution_off.expect[5],
}
```

In [14]:

```
#not being used:
def aveg_calculator_from_density_matrix(operator_to_aveg_off, psis_off):
    # n_aveg_off = []
    # for i in range(0, NT):
    psii = psis_off[i]
    #density_matrix = ket2dm(psi0) #use only in case of no collapse operators in mesolve
    density_matrix_off = psii
    n_aveg.append((operator_to_aveg * density_matrix).tr())
    n_aveg_round_off = [round(x, 5) for x in n_aveg_off]
    # return n_aveg_round_off
```

EIGENVALUE OFF - THEORETICAL

In [15]:

```
nup_aveg_off = evolution_off.expect[0]
ndw_aveg_off = evolution_off.expect[1]
npx_aveg_off = evolution_off.expect[2]
nmx_aveg_off = evolution_off.expect[3]
nyp_aveg_off = evolution_off.expect[4]
nym_aveg_off = evolution_off.expect[5]
```

In [16]:

```
#plot figures:
#for i in avegs_off:
#    plt.plot(times, avegs_off.get(i))
#plt.bar(times, nup_aveg, 0.7, color='g')
#plt.bar(times, ndw_aveg, 0.7, color='g')
#plt.savefig(i+'.png')
#plt.clf()
#plt.show
```

PROBABILITY IMPLEMENTATION

In [17]:

```
def probability_list(n_aveg):
    p_list = Gamma0 * deltat * np.array(n_aveg)
    p_list_round = [round(x, 6) for x in p_list]
    return p_list_round
```

In [18]:

```
def total_probability_summed(p_list):
    p = np.sum(p_list)
    q = 1 - p
    return {'p': p, 'q': q}
```

In [19]:

```
def total_probability_integrated(n_aveg):
    y = np.array(n_aveg)
    p = integrate.simps(y, x=None, dx=tmax/NT)
    q = 1 - p
    dicti = {'p': p, 'q': q}
    return dicti
```

SIMULATION DETECTION (PROBABILITY)

In [20]:

```
def detection(R, prob):
    times_detected_list = []
    for i in range(R):
        x = np.random.choice(detection_times_list, p=prob)
        times_detected_list.append(x)
    counting = Counter(times_detected_list)
    counting.pop(tmax+tmax/NT)
    return dict(counting)
```

Experiment simulation (PROBABILITY)

In [21]:

```
def experiment_simulation(n_aveg):
    p_list = probability_list(n_aveg)
    p_q_total = total_probability_summed(p_list)
    p_total = p_q_total.get('p')
    q_total = p_q_total.get('q')
    prob_detections = np.append(p_list, q_total)
    detection_dict = detection(Repetitions, prob_detections)
    return detection_dict
```

In [22]:

```
detection_dict_up = experiment_simulation(nup_aveg)
detection_dict_dw = experiment_simulation(ndw_aveg)
detection_dict_xp = experiment_simulation(nxp_aveg)
detection_dict_xm = experiment_simulation(nxm_aveg)
detection_dict_yp = experiment_simulation(nyp_aveg)
detection_dict_ym = experiment_simulation(nym_aveg)
```

In [23]:

```
#plt.bar(detection_dict_up.keys(), detection_dict_up.values(), 0.05, color='b', Label='detection_dict_up')
#plt.bar(detection_dict_dw.keys(), detection_dict_dw.values(), 0.05, color='y', Label='detection_dict_dw')
#plt.bar(detection_dict_xp.keys(), detection_dict_xp.values(), 0.05, color='g', Label='detection_dict_xp')
#plt.bar(detection_dict_xm.keys(), detection_dict_xm.values(), 0.05, color='r', Label='detection_dict_xm')
#plt.bar(detection_dict_yp.keys(), detection_dict_yp.values(), 0.05, color='#EE82EE', Label='detection_dict_yp')
#plt.bar(detection_dict_ym.keys(), detection_dict_ym.values(), 0.05, color='#653700', Label='detection_dict_ym')
#plt.legend()
#plt.show()
```


Detection update

In [24]:

```
detections = {}
for i in avegs:
    detections.update({i: experiment_simulation(avegs.get(i))})
```

In [25]:

```
#fig, figs_detections = plt.subplots(3)
#plot_index = {'nup': 0, 'ndw': 0, 'nxp': 1, 'nxm': 1, 'nyp': 2, 'nym': 2}
#for i in detections:
#    index = plot_index.get(i)
#    figs_detections[index].plot(List(detections.get(i).keys()), List(detections.get(i).values()), '.', color='b')
#    figs_detections[index].bar(List(detections.get(i).keys()), List(detections.get(i).values()), 0.01, color='r')
#    figs_detections[index].bar(List(detections.get(i).keys()), List(detections.get(i).values()), 0.01, color='g')

#plt.plot(List(detections.get('nup').keys()), List(detections.get('nup').values()), '.', color='b')
#plt.bar(List(detections.get('nym').keys()), List(detections.get('nym').values()), 0.01, color='g')
#plt.bar(List(detections.get('nyp').keys()), List(detections.get('nyp').values()), 0.01, color='r')

#axtr[0].plot(List(detections.get('nup').keys()), List(detections.get('nup').values()), '.')
#axtr[0].plot(List(detections.get('ndw').keys()), List(detections.get('ndw').values()), '.')
#axtr[1].plot(List(detections.get('nxp').keys()), List(detections.get('nxp').values()), '.')
#axtr[1].plot(List(detections.get('nxm').keys()), List(detections.get('nxm').values()), '.')
```

In [26]:

```
#plt.bar(detections.get('nup').keys(), detections.get('nup').values(), 0.05, color='b')
#plt.bar(detections.get('ndw').keys(), detections.get('ndw').values(), 0.05, color='r')
```

UPDATE FOR STATES NO DETECTED TO BE EQUAL 0

In [27]:

```
def dic_full(dic):
    lista_keys = dic.keys()
    lista_keys_not_detected = []
    dic_keys_not_detected = {}
    for i in times:
        if i not in lista_keys:
            lista_keys_not_detected.append(i)
    for i in lista_keys_not_detected:
        dic_keys_not_detected.update({i: 0})
    dic.update(dic_keys_not_detected)
    return dic
```

NEW UPDATE

In [28]:

```
def sorting_dicti_keys(dic):
    lista_keys = list(dic.keys())
    lista_keys.sort()
    dic_new = {}
    for i in lista_keys:
        dic_new.update({i: dic.get(i)})
    return dic_new
```

Detection of states numbers update

In [29]:

```
dic_up_full = sorting_dicti_keys(dic_full(detections.get('nup')))
dic_dw_full = sorting_dicti_keys(dic_full(detections.get('ndw')))
dic_xp_full = sorting_dicti_keys(dic_full(detections.get('nxp')))
dic_xm_full = sorting_dicti_keys(dic_full(detections.get('nxm')))
dic_yp_full = sorting_dicti_keys(dic_full(detections.get('nyp')))
dic_ym_full = sorting_dicti_keys(dic_full(detections.get('nym')))
```

In [30]:

```
#plt.plot(List(dic_up_full.keys()), List(dic_up_full.values()))
```

CALLING DIAGONAL OFF ELEMENTS

In [31]:

```
# separating real and imaginary off diagonal values for system with collapse operators
lista_off_diagonal = []
for i in psis:
    lista_off_diagonal.append((b01.dag()*i*b10)[0][0][0])

lista_off_diagonal_real = []
lista_off_diagonal_imag = []

for i in lista_off_diagonal:
    lista_off_diagonal_real.append(i.real)
    lista_off_diagonal_imag.append(i.imag)

# separating real and imaginary off diagonal values for system where there is no collapse operators
# separating real and imaginary off diagonal values
lista_off_diagonal_off = []
for i in psis_off:
    lista_off_diagonal_off.append((b01.dag()*i*b10)[0][0][0])

lista_off_diagonal_real_off = []
lista_off_diagonal_imag_off = []

for i in lista_off_diagonal_off:
    lista_off_diagonal_real_off.append(i.real)
    lista_off_diagonal_imag_off.append(i.imag)
```

RESULTS ORGANIZED IN THE DICIONARY

In [32]:

```
dic = {
    'time': times,
    'nup': np.array(list(dic_up_full.values())),
    'ndw': np.array(list(dic_dw_full.values())),
    'nxp': np.array(list(dic_xp_full.values())),
    'nxm': np.array(list(dic_xm_full.values())),
    'nyp': np.array(list(dic_yp_full.values())),
    'nym': np.array(list(dic_ym_full.values())),
    'rho_off_re': lista_off_diagonal_real,
    'rho_off_im': lista_off_diagonal_imag,
}
df2 = pd.DataFrame(dic)
```

Definition of function to calculating probability and density matrix elements from probability

In [33]:

```
def determine_probability_from_counting(x):
    return x / Repetitions

def rho_element_calculation_from_probability(x):
    return x / (deltat * Gamma0)
```

Calculing probability

In [34]:

```
df2['Pup'] = df2['nup'].map(determine_probability_from_counting) #probability up
df2['Pdw'] = df2['ndw'].map(determine_probability_from_counting)
df2['Pxp'] = df2['nxp'].map(determine_probability_from_counting)
df2['Pxm'] = df2['nxm'].map(determine_probability_from_counting)
df2['Pyp'] = df2['nyp'].map(determine_probability_from_counting)
df2['Pym'] = df2['nym'].map(determine_probability_from_counting)
```

Calculing density matrix elements

In [35]:

```
df2['rho_up'] = df2['Pup'].map(rho_element_calculation_from_probability) #rho up
df2['rho_dw'] = df2['Pdw'].map(rho_element_calculation_from_probability)
df2['rho_xp'] = df2['Pxp'].map(rho_element_calculation_from_probability)
df2['rho_xm'] = df2['Pxm'].map(rho_element_calculation_from_probability)
df2['rho_yp'] = df2['Pyp'].map(rho_element_calculation_from_probability)
df2['rho_ym'] = df2['Pym'].map(rho_element_calculation_from_probability)
```

RESULTS

schedule

In [36]:

```
df2
```

Out[36]:

	time	nup	ndw	npx	nxm	nyp	nym	rho_off_re	rho_off_im	Pup	...	Pxp	Pxm	Pyp	Pym	rho_up	rho_dw	rho_xp
0	0.000000	469	0	246	234	251	282	0.0	0.000000e+00	0.000938	...	0.000492	0.000468	0.000502	0.000564	0.938	0.000	0.492
1	0.010050	523	1	271	246	253	253	0.0	3.096071e-02	0.001046	...	0.000542	0.000492	0.000506	0.000506	1.046	0.002	0.542
2	0.020101	511	3	239	246	212	259	0.0	6.063829e-02	0.001022	...	0.000478	0.000492	0.000424	0.000518	1.022	0.006	0.478
3	0.030151	467	4	232	265	197	301	0.0	8.895392e-02	0.000934	...	0.000464	0.000530	0.000394	0.000602	0.934	0.008	0.464
4	0.040201	457	9	243	239	161	263	0.0	1.158375e-01	0.000914	...	0.000486	0.000478	0.000322	0.000526	0.914	0.018	0.486
...
195	1.959799	12	0	3	6	5	1	0.0	-3.107598e-03	0.000024	...	0.000006	0.000012	0.000010	0.000002	0.024	0.000	0.006
196	1.969849	8	0	4	10	6	5	0.0	-2.297672e-03	0.000016	...	0.000008	0.000020	0.000012	0.000010	0.016	0.000	0.008
197	1.979899	7	0	4	5	7	1	0.0	-1.508062e-03	0.000014	...	0.000008	0.000010	0.000014	0.000002	0.014	0.000	0.008
198	1.989950	8	0	5	6	2	11	0.0	-7.413792e-04	0.000016	...	0.000010	0.000012	0.000004	0.000022	0.016	0.000	0.010
199	2.000000	11	0	4	5	5	6	0.0	-3.866662e-03	0.000022	...	0.000008	0.000010	0.000010	0.000012	0.022	0.000	0.008

200 rows × 21 columns

Diagonal off element equation

In [37]:

```
df2['Re_rho_updw'] = 0.5 * (df2['rho_xp'] - df2['rho_xm']) #diagonal off element equation
df2['Im_rho_updw'] = - 0.5 * (df2['rho_yp'] - df2['rho_ym'])
```

In [38]:

```
#df2
```

In [39]:

```
df2.to_csv('teste.csv')
```

In [40]:

```
#plt.plot(df2['rho_off_im'])
#plt.plot(df2['Im_rho_updw'])
```

In [41]:

```
#plt.plot(df2['rho_off_re'])
```

MACHINE LEARNING TO CALCULING DENSITY MATRIX ELEMENTS

CALLING DATASET

In [42]:

```
# rho_up
x = df2.iloc[:, 0:1].values
y_up = df2.iloc[:, 15].values
y_dw = df2.iloc[:, 16].values
y_up_x = df2.iloc[:, 17].values
y_dw_x = df2.iloc[:, 18].values
y_up_y = df2.iloc[:, 19].values
y_dw_y = df2.iloc[:, 20].values
y_updw_re = df2.iloc[:, 21].values
y_updw_im = df2.iloc[:, 22].values
```

IMPLEMENTING POLYNOMIAL REGRESSION

In [43]:

```
# Fitting Polynomial Regression to the dataset

poly = PolynomialFeatures(degree = 10)
x_poly = poly.fit_transform(x)

poly_up = poly.fit(x_poly, y_up)
poly_dw = poly.fit(x_poly, y_dw)

lin1 = LinearRegression()
lin2 = LinearRegression()
lin_regre_up = lin1.fit(x_poly, y_up)
lin_regre_dw = lin2.fit(x_poly, y_dw)
```

In [44]:

```
#plt.scatter(x, y_up, color = 'blue', Label = r'$\rho_{\uparrow}$')
#plt.scatter(x, y_dw, color = 'red', Label = r'$\rho_{\downarrow}$')
#plt.plot(x, lin1.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'red')
#plt.plot(x, lin2.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'blue')

#plt.title(r'$\rho_{\uparrow}$')
#plt.xlabel('Time')
#plt.ylabel('number of exit')
#plt.legend()
#plt.show()
```

In [45]:

```
# Fitting Polynomial Regression to the dataset

poly = PolynomialFeatures(degree = 10)
x_poly = poly.fit_transform(x)

poly_up_x = poly.fit(x_poly, y_up_x)
poly_dw_x = poly.fit(x_poly, y_dw_x)

lin3 = LinearRegression()
lin4 = LinearRegression()
lin_regr_up_x = lin3.fit(x_poly, y_up_x)
lin_regre_dw_x = lin4.fit(x_poly, y_dw_x)
```

In [46]:

```
#plt.scatter(x, y_up_x, color = 'blue', Label = r'$\rho_{\uparrow}^x$')
#plt.scatter(x, y_dw_x, color = 'red', Label = r'$\rho_{\downarrow}^x$')

#plt.plot(x, lin3.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'yellow')
#plt.plot(x, lin4.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'black')

#plt.title('rho_up_x')
#plt.xlabel('Time')
#plt.ylabel('number of exit')
#plt.legend()
#plt.show()
```

In [47]:

```
# Fitting Polynomial Regression to the dataset

poly = PolynomialFeatures(degree = 10)
x_poly = poly.fit_transform(x)

poly_up_y = poly.fit(x_poly, y_up_y)
poly_dw_y = poly.fit(x_poly, y_dw_y)

lin5 = LinearRegression()
lin6 = LinearRegression()
lin_regr_up_y = lin5.fit(x_poly, y_up_y)
lin_regr_dw_y = lin6.fit(x_poly, y_dw_y)
```

In [48]:

```
#plt.scatter(x, y_up_y, color = 'blue', Label = r'\rho_{\uparrow}^{y}$')
#plt.scatter(x, y_dw_y, color = 'red', Label = r'\rho_{\downarrow}^{y}$')

#plt.plot(x, lin5.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'red')
#plt.plot(x, lin6.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'blue')

#plt.title('rho_up_y')
#plt.xlabel('Time')
#plt.ylabel('number of exit')
#plt.legend()
#plt.show()
```

In [49]:

```
# Fitting Polynomial Regression to the dataset
```

```
poly = PolynomialFeatures(degree = 10)
x_poly = poly.fit_transform(x)
```

```
poly_off_re = poly.fit(x_poly, y_updw_re)
poly_off_im = poly.fit(x_poly, y_updw_im)
```

```
lin7 = LinearRegression()
lin8 = LinearRegression()
lin_regr_off_re = lin7.fit(x_poly, y_updw_re)
lin_regr_off_im = lin8.fit(x_poly, y_updw_im)
```

In [50]:

```
#plt.scatter(x, y_updw_re, color = 'blue', Label = r'$Re[\rho_{\uparrow \downarrow}]$')
#plt.scatter(x, y_updw_im, color = 'red', Label = r'$Im[\rho_{\uparrow \downarrow}]$')
```

```
#plt.plot(x, lin7.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'red')
#plt.plot(x, lin8.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'blue')
```

```
#plt.title('rho_updw_re')
#plt.xlabel('Time')
#plt.ylabel('number of exit')
#plt.legend()
#plt.show()
```

SCORE

In [51]:

```
r_sq_up = lin1.score(x_poly, y_up) #??
r_sq_dw = lin2.score(x_poly, y_dw)
r_sq_up_x = lin3.score(x_poly, y_up_x)
r_sq_dw_x = lin4.score(x_poly, y_dw_x)
r_sq_up_y = lin5.score(x_poly, y_up_y)
r_sq_dw_y = lin6.score(x_poly, y_dw_y)
r_sq_off_re = lin7.score(x_poly, y_updw_re)
r_sq_off_im = lin8.score(x_poly, y_updw_im)
print('Rho_up:', r_sq_up)
print('Rho_dw', r_sq_dw)
print('Rho_up_x:', r_sq_up_x)
print('Rho_dw_x:', r_sq_dw_x)
print('Rho_up_y:', r_sq_up_y)
print('Rho_dw_y:', r_sq_dw_y)
print('Rho_off_re:', r_sq_off_re)
print('Rho_off_im:', r_sq_off_im)
```

```
Rho_up: 0.9945703597497735
Rho_dw 0.9844683002638349
Rho_up_x: 0.98763210986606
Rho_dw_x: 0.9848940111424077
Rho_up_y: 0.984960390378773
Rho_dw_y: 0.9937915817104391
Rho_off_re: 0.09698225792230264
Rho_off_im: 0.9913873781361824
```

In [52]:

```
colnames = ['Name', 'Score']
score = pd.DataFrame([[r'\rho_{\uparrow}$', r_sq_up],
                     [r'\rho_{\downarrow}$', r_sq_dw],
                     [r'\rho_{x+}$', r_sq_up_x],
                     [r'\rho_{x-}$', r_sq_dw_x],
                     [r'\rho_{y+}$', r_sq_up_y],
                     [r'\rho_{y-}$', r_sq_dw_y],
                     [r'Re[\uparrow\downarrow]$', r_sq_off_re],
                     [r'Im[\uparrow\downarrow]$', r_sq_off_im]], columns = colnames)

score.set_index('Name', inplace = True)
```

In [53]:

score

Out[53]:

	Score
Name	
ρ_{\uparrow}	0.994570
ρ_{\downarrow}	0.984468
ρ_{x+}	0.987632
ρ_{x-}	0.984894
ρ_{y+}	0.984960
ρ_{y-}	0.993792
$Re[\uparrow\downarrow]$	0.096982
$Im[\uparrow\downarrow]$	0.991387

GRAPHICS

Experimental density matrix and theory density matrix

In [54]:

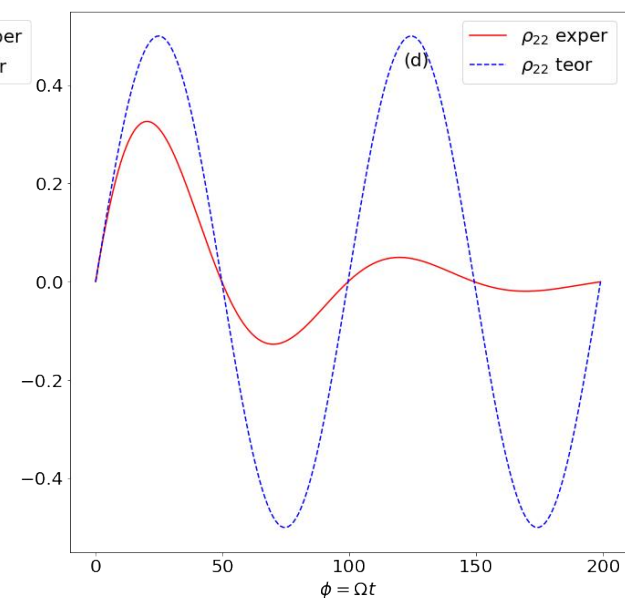
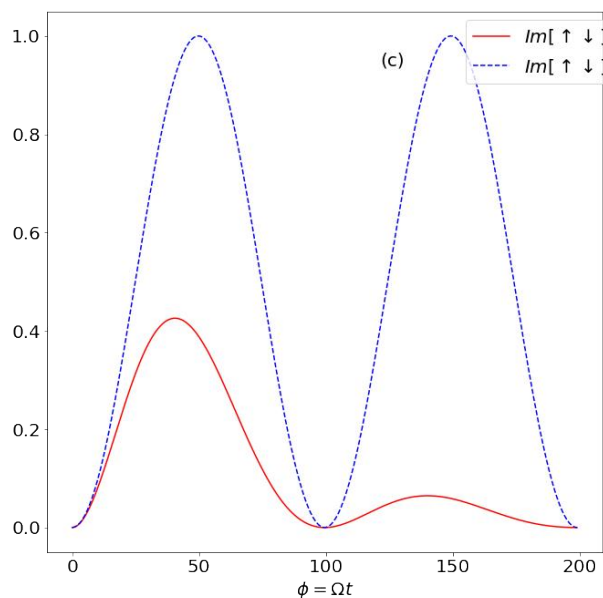
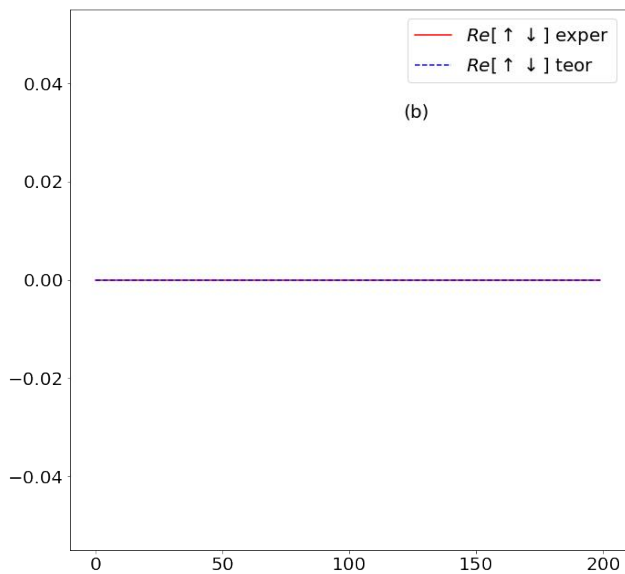
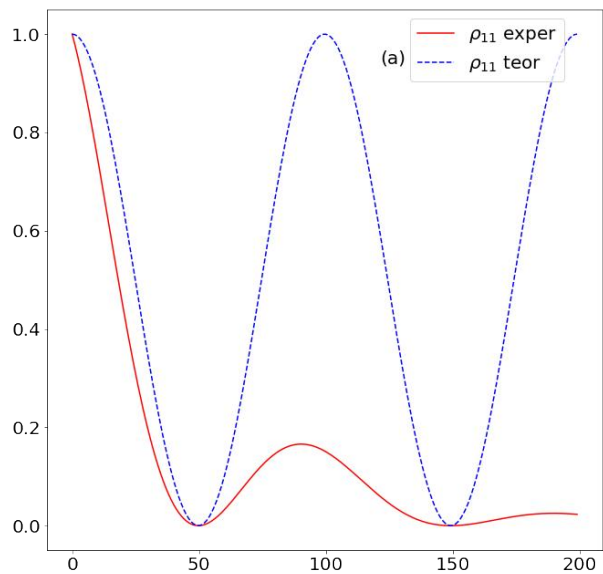
```
plt.figure(figsize=(24,24))
plt.subplot(2, 2, 1)
plt.text(0.6, 0.9, R'(a)', transform=plt.gca().transAxes)
plt.plot(nup_aveg, c='red')
plt.plot(nup_aveg_off, c='blue', ls='--')
plt.xticks([0, 50, 100, 150, 200])
#plt.legend()
plt.legend([r'$\rho_{11}$ exper', r'$\rho_{11}$ teor'],
           bbox_to_anchor=(0.6374, 0.85))

plt.subplot(2, 2, 2)
plt.text(0.6, 0.8, R'(b)', transform=plt.gca().transAxes)
plt.plot(df2['rho_off_re'], c='red', label = r'$Re[\uparrow\downarrow]$ exper')
plt.plot(lista_off_diagonal_real_off, c='blue', ls='--', label = r'$Re[\uparrow\downarrow]$ teor')
plt.xticks([0, 50, 100, 150, 200])
plt.legend()

plt.subplot(2, 2, 3)
plt.text(0.6, 0.9, R'(c)', transform=plt.gca().transAxes)
plt.plot(ndw_aveg, c='red')
plt.plot(ndw_aveg_off, c='blue', ls='--')
plt.xticks([0, 50, 100, 150, 200])
plt.legend([R'$Im[\uparrow\downarrow]$ exper', R'$Im[\uparrow\downarrow]$ teor'],
           bbox_to_anchor=(0.7378, 0.85))
#plt.tick_params(labelcolor='none', which='both', top=False, bottom=False, left=False, right=False)
plt.xlabel(R'$\phi = \Omega t$')

plt.subplot(2, 2, 4)
plt.text(0.6, 0.9, R'(d)', transform=plt.gca().transAxes)
plt.plot(df2['rho_off_im'], c='red', label = r'$\rho_{22}$ exper')
plt.plot(lista_off_diagonal_imag_off, c='blue', ls='--', label = r'$\rho_{22}$ teor')
plt.xticks([0, 50, 100, 150, 200])
plt.legend()
#plt.tick_params(labelcolor='none', which='both', top=False, bottom=False, left=False, right=False)
plt.xlabel(R'$\phi = \Omega t$')

#plt.savefig('fig3(0.5).png')
plt.show()
```



Density matriz by the via machine learning

In [55]:

```
plt.figure(figsize=(24,24))

plt.subplot(2, 2, 1)
plt.text(0.6, 0.9, R'(a)', transform=plt.gca().transAxes)
plt.scatter(x, y_up, color = 'blue', label = r' $\rho_{z+}$')
plt.scatter(x, y_dw, color = 'red', label = r' $\rho_{z-}$')
plt.plot(x, lin1.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'blue')
plt.plot(x, lin2.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'red')
plt.legend()
#plt.xlabel(R'$\phi = \Omega t$ (Segundos)')
#plt.ylabel(R'Oscilação')
plt.xticks([0.00, 0.50, 1, 1.50, 2])

plt.subplot(2, 2, 2)
plt.text(0.6, 0.9, R'(b)', transform=plt.gca().transAxes)
plt.scatter(x, y_up_x, color = 'blue', label = r' $\rho_{x+}$')
plt.scatter(x, y_dw_x, color = 'red', label = r' $\rho_{x-}$')
plt.plot(x, lin3.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'blue')
plt.plot(x, lin4.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'red')
plt.legend()
plt.xticks([0.00, 0.50, 1, 1.50, 2])

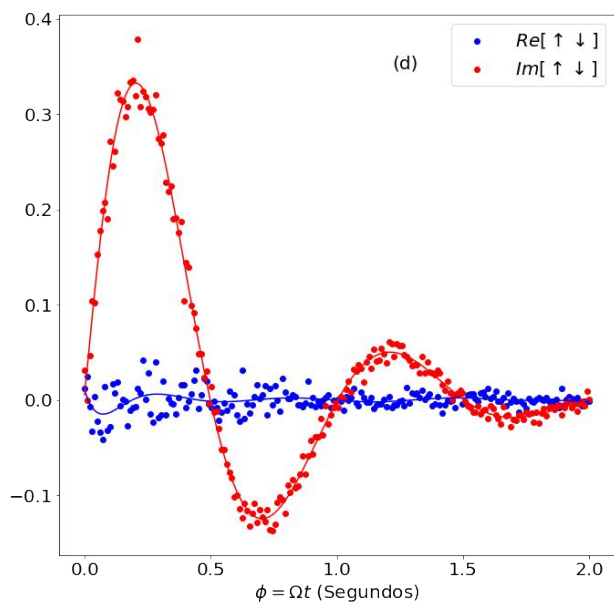
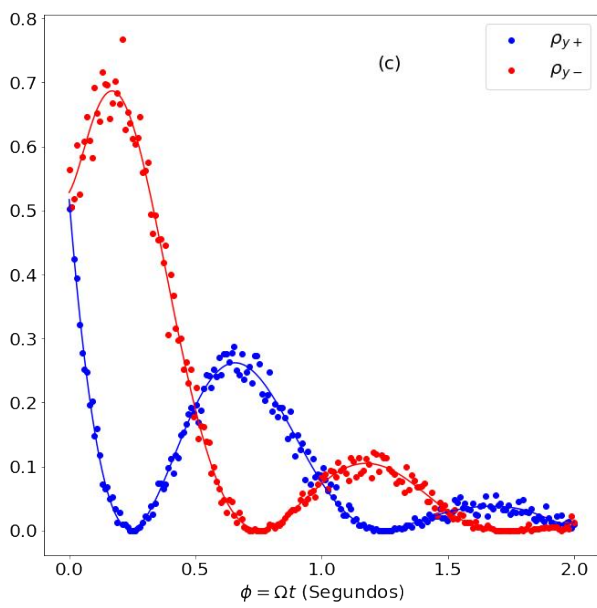
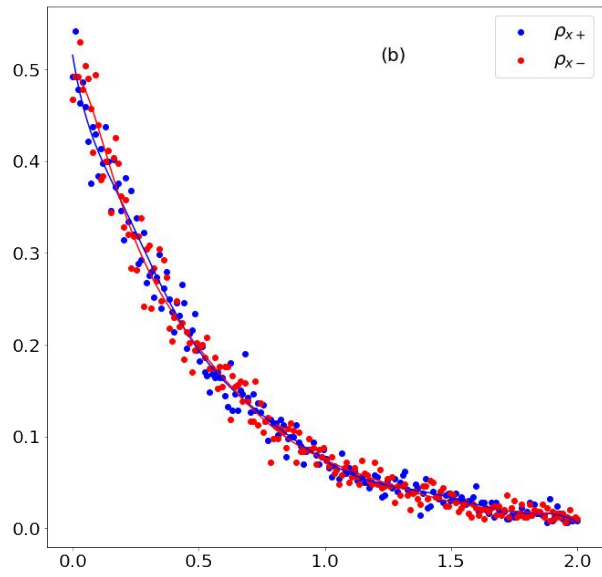
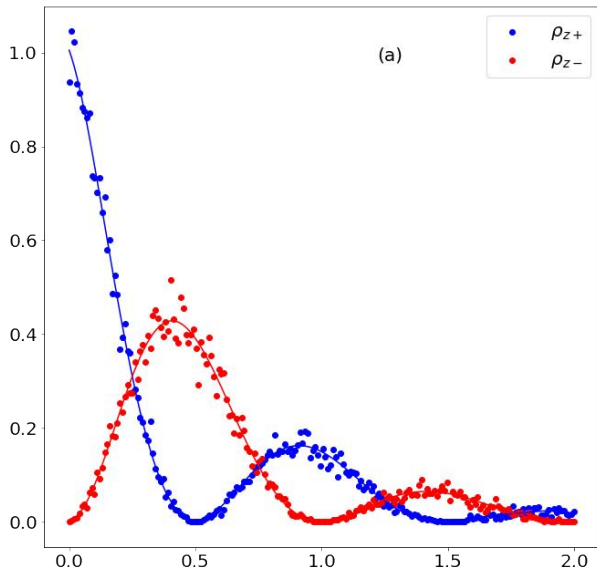
plt.subplot(2, 2, 3)
plt.text(0.6, 0.9, R'(c)', transform=plt.gca().transAxes)
plt.scatter(x, y_up_y, color = 'blue', label = r' $\rho_{y+}$')
plt.scatter(x, y_dw_y, color = 'red', label = r' $\rho_{y-}$')
plt.plot(x, lin5.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'blue')
plt.plot(x, lin6.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'red')
plt.legend()
plt.xticks([0.00, 0.50, 1, 1.50, 2])
plt.xlabel(R'$\phi = \Omega t$ (Segundos)')

plt.subplot(2, 2, 4)
plt.text(0.6, 0.9, R'(d)', transform=plt.gca().transAxes)
plt.scatter(x, y_updw_re, color = 'blue', label = r' $Re[\uparrow\downarrow]$')
plt.scatter(x, y_updw_im, color = 'red', label = r' $Im[\uparrow\downarrow]$')
plt.plot(x, lin7.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'blue')
plt.plot(x, lin8.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'red')
plt.legend()
plt.xticks([0.00, 0.50, 1, 1.50, 2])
#plt.tick_params(labelcolor='none', which='both', top=False, bottom=False, left=False, right=False)
plt.xlabel(R'$\phi = \Omega t$ (Segundos)')
#plt.ylabel(R'Oscilação')

#plt.savefig('fig2(0.5).png')
```

Out[55]:

Text(0.5, 0, '\$\phi = \Omega t\$ (Segundos)')



Tunneling events counted (probability)

In [56]:

```
fig, ((ax1, ax2), (ax3, ax4), (ax5, ax6)) = plt.subplots(3, 2, figsize=(24, 24))
ax1.text(-0.6, 3.3, R'(a)', transform=plt.gca().transAxes)
ax2.text(0.6, 3.3, R'(b)', transform=plt.gca().transAxes)
ax3.text(-0.6, 2.1, R'(c)', transform=plt.gca().transAxes)
ax4.text(0.6, 2.1, R'(d)', transform=plt.gca().transAxes)
ax5.text(-0.6, 0.9, R'(e)', transform=plt.gca().transAxes)
ax6.text(0.6, 0.9, R'(f)', transform=plt.gca().transAxes)

c0 = ax1.bar(detection_dict_up.keys(), detection_dict_up.values(), 0.05, color='b', label=r"$\mathcal{N}_{z+}$")
#ax1.set_title(r'$\rho_{\uparrow}$')
ax1.legend()
#ax1.set_xlabel(r'Tempo')
#plt.ylabel(r'Número de tunelamento')

c1 = ax2.bar(detection_dict_dw.keys(), detection_dict_dw.values(), 0.05, color='r', label=r"$\mathcal{N}_{z-}$")
#ax2.set_title(r'$\rho_{\downarrow}$')
ax2.legend()

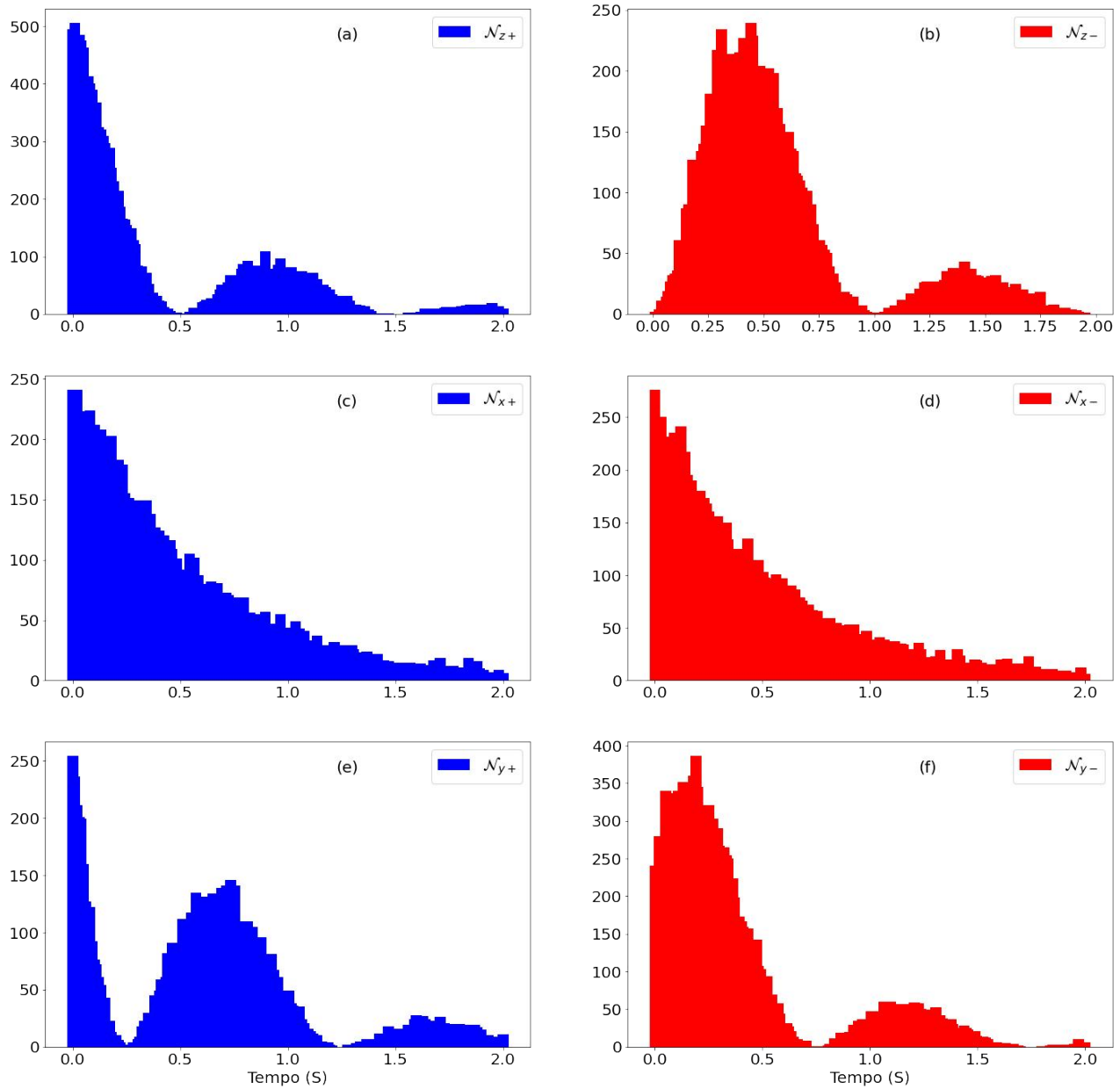
c2 = ax3.bar(detection_dict_xp.keys(), detection_dict_xp.values(), 0.05, color='b', label=r"$\mathcal{N}_{x+}$")
#ax3.set_title(r'$\rho_{\uparrow\uparrow}^x$')
ax3.legend()

c3 = ax4.bar(detection_dict_xm.keys(), detection_dict_xm.values(), 0.05, color='r', label=r"$\mathcal{N}_{x-}$")
#ax4.set_title(r'$\rho_{\downarrow\downarrow}^x$')
ax4.legend()
#plt.xlabel(r'Tempo')
#plt.ylabel(r'Número de tunelamento')

c4 = ax5.bar(detection_dict_yp.keys(), detection_dict_yp.values(), 0.05, color='b', label=r"$\mathcal{N}_{y+}$")
#ax5.set_title(r'$\rho_{\uparrow\uparrow}^y$')
#plt.text(0.6, 0.9, R'(e)', transform=plt.gca().transAxes)
ax5.legend()
ax5.set_xlabel(r'Tempo (S)')
#ax5.set_ylabel(r'Amplitude da probabilidade')

c5 = ax6.bar(detection_dict_ym.keys(), detection_dict_ym.values(), 0.05, color='r', label=r"$\mathcal{N}_{y-}$")
#ax6.set_title(r'$\rho_{\downarrow\downarrow}^y$')
ax6.legend()
ax6.set_xlabel(r'Tempo (S)')
#ax6.set_ylabel(r'Amplitude da probabilidade')

#plt.savefig('fig1(0.5).png')
plt.show()
```



Bloch sphere

In [57]:

```
detections = pd.read_csv('teste.csv')
```

In [58]:

```

#creating a point , a single vector, a vector corresponding to the up state on Bloch sphere
b = Bloch()
def Stokes_xy(lista):
    Stokesxy_lista = []
    for i in lista:
        Stokesxy_lista.append(2*i)
    return Stokesxy_lista

def Stokes_z(lista_up, lista_dw):
    Stokesz_lista = []
    for i in range(len(lista_up)):
        Stokesz_lista.append(lista_up[i]-lista_dw[i])
    return Stokesz_lista

Sx = Stokes_xy(detections['Re_rho_updw'])
Sy = Stokes_xy(detections['Im_rho_updw'])
Sz = Stokes_z(detections['rho_up'], detections['rho_dw'])

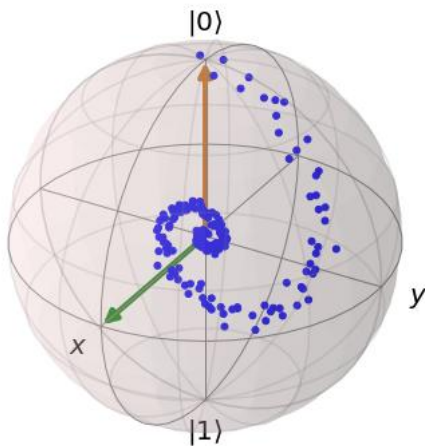
pnts = [Sx, Sy, Sz]
b.vector_width = 4
vecB = [1,0,0] #vector magnetic field
up = basis(2,0) # initial basi

b.add_points(pnts)
b.add_vectors(vecB)
b.add_states(up)

b.font_size = 20
b.view = [-60,30]
#b.xlabel = ['$x$', 'B'] #+x and -x (Labels use LaTeX)
#b.xlpos = [np.pi/6, np.pi/6]
#b.ylpos = [np.pi/6, np.pi/6]

plt.savefig('fig4(0.1).png')
b.show()

```



In []:

In []:

In [60]:

```

plt.figure(figsize=(18,18))

#ax0 = plt.subplot(2, 2, 1)
plt.text(0.9, 0.9, R'(a)', transform=plt.gca().transAxes)
plt.legend([c0, c1], [r"$\rho_{\uparrow}$", r"$\rho_{\downarrow}$"],
#Loc = "upper left", bbox_to_anchor=(0.7, 0.9))

#ax1 = ax0.twinx() # Create a twin of Axes with a shared x-axis but independent y-axis.
#ax2 = plt.subplot(2, 2, 2)
plt.text(0.9, 0.9, R'(b)', transform=plt.gca().transAxes)
plt.legend([c2, c3], [r"$\rho_{\uparrow}^x$", r"$\rho_{\downarrow}^x$"],
#Loc = "upper left", bbox_to_anchor=(0.7, 0.9))

#ax3 = ax2.twinx() # Create a twin of Axes with a shared x-axis but independent y-axis.
#ax4 = plt.subplot(2, 2, 3)
plt.text(0.9, 0.9, R'(d)', transform=plt.gca().transAxes)
plt.legend([c4, c5], [r"$\rho_{\uparrow}^y$", r"$\rho_{\downarrow}^y$"],
#Loc = "upper left", bbox_to_anchor=(0.7, 0.9))

#ax5 = ax4.twinx()
#ax6 = plt.subplot(2, 2, 4)
plt.text(0.9, 0.9, R'(d)', transform=plt.gca().transAxes)
plt.legend([c6, c7], [r"$Re[\rho_{\uparrow}]$", r"$Im[\rho_{\uparrow}]$"],
#Loc = "upper left", bbox_to_anchor=(0.5, 0.9))

#ax7 = ax6.twinx()

#ax1.get_shared_y_axes().join(ax1, ax5)

#c0, = ax0.plot(x, y_up, 'o', c='red')
#c1, = ax1.plot(x, y_dw, 'o', c='blue')
#c0, = ax0.plot(x, lin1.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'red')
#c1, = ax1.plot(x, lin2.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'blue')

#c2, = ax2.plot(x, y_up_x, 'o', c='red')
#c3, = ax3.plot(x, y_dw_x, 'o', c='blue')
#c2, = ax2.plot(x, lin3.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'red')
#c3, = ax3.plot(x, lin4.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'blue')

#c4, = ax4.plot(x, y_up_y, 'o', c='red')
#c5, = ax5.plot(x, y_dw_y, 'o', c='blue')
#c4, = ax4.plot(x, lin5.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'red')
#c5, = ax5.plot(x, lin6.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'blue')

#c6, = ax6.plot(x, y_updw_re, 'o', c='red')
#c7, = ax7.plot(x, y_updw_im, 'o', c='blue')
#c6, = ax6.plot(x, lin7.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'red')
#c7, = ax7.plot(x, lin8.predict(poly.fit_transform(x)), color = 'blue')
plt.savefig('fig2.png')

plt.show()

```

In [61]:

```

#fig, ((ax1, ax2), (ax3, ax4), (ax5, ax6), (ax7, ax8)) = plt.subplots(4, 2, figsize=(8, 8))
#fig.suptitle('Results')
#ax1.plot(x, y_up)
#ax1.set_title(r'$\rho_{\uparrow}$')
#ax2.plot(x, y_dw)
#ax2.set_title(r'$\rho_{\downarrow}$')
#ax3.plot(x, y_up_x, 'tab:orange')
#ax3.set_title(r'$\rho_{\uparrow}^x$')
#ax4.plot(x, y_dw_x, 'tab:orange')
#ax4.set_title(r'$\rho_{\downarrow}^x$')
#ax5.plot(x, y_up_y, 'tab:green')
#ax5.set_title(r'$\rho_{\uparrow}^y$')
#ax6.plot(x, y_dw_y, 'tab:green')
#ax6.set_title(r'$\rho_{\downarrow}^y$')
#ax7.plot(x, y_updw_re, 'tab:red')
#ax7.set_title(r'$Re[\rho_{\uparrow\downarrow}]$')
#ax8.plot(x, y_updw_im, 'tab:red')
#ax8.set_title(r'$Im[\rho_{\uparrow\downarrow}]$')

plt.show()

```

In []: