# Caminhadas quânticas em espaço de energia e a emergência de estados térmicos

SANTOS, Alana Spak[1]; ANGELO, Renato Moreira[1]

Universidade Federal do Paraná - Departamento de Física[1]

alana.spak@ufpr.br

**Palavras-Chave**: termalização; caminhadas quânticas; coerência quântica.

**Resumo**

Apresentamos uma formulação de caminhadas quânticas no espaço de energia para investigar processos de termalização. Embora as populações evoluam para a distribuição de Gibbs, coerências persistentes mantêm o estado quântico afastado do equilíbrio térmico. O modelo evidencia a distinção entre termalização das populações e convergência do estado quântico.

## I. Introdução

Um problema fundamental na interface entre a mecânica quântica e a física estatística diz respeito à emergência de processos irreversíveis em sistemas quânticos. Isso porque a dinâmica de um sistema quântico fechado é descrita por transformações unitárias e, portanto, reversíveis (Gogolin e Eisert (2016)). Surge, então, uma questão central: como comportamentos irreversíveis podem emergir a partir de uma dinâmica fundamentalmente reversível?

Entre os fenômenos associados à irreversibilidade destaca-se a termalização, processo pelo qual um sistema evolui para um estado de equilíbrio térmico. A compreensão dos mecanismos responsáveis por esse comportamento tem motivado intensas investigações ao longo das últimas décadas. Uma das abordagens mais tradicionais atribui a emergência do equilíbrio térmico à interação entre o sistema de interesse e um ambiente com muitos graus de liberdade (Popescu, Short e Winter (2006)), sendo a decoerência um dos mecanismos centrais para a perda de informação acessível e o surgimento de uma irreversibilidade efetiva (Zurek (2003)).

Neste trabalho, entretanto, adotamos uma perspectiva distinta baseada na descrição efetiva da dinâmica do sistema. Para isso, introduzimos uma formulação em termos de caminhadas quânticas (Kempe (2003)) no espaço de energia, na qual os níveis energéticos são reinterpretados como vértices de uma rede unidimensional. Nessa construção, a

dinâmica térmica é descrita como um processo de transporte ao longo da rede, fornecendo um modelo simples para investigar equilibração e termalização sem recorrer explicitamente a descrições microscópicas de sistema-reservatório.

Essa formulação permite explorar a relação entre transporte, coerência quântica e comportamento térmico. A construção permite investigar em que medida a convergência das populações para uma distribuição de equilíbrio constitui uma condição suficiente para caracterizar a termalização de um sistema quântico. Em particular, mostramos que a distribuição de populações pode convergir para uma distribuição de Gibbs enquanto o estado quântico completo permanece afastado do estado térmico devido à persistência de coerências.

## II. Fundamentação Teórica/Materiais e Métodos

### *A. Dinâmica clássica em espaço de energia*

Consideramos um sistema quântico cujos níveis de energia são representados pelos estados $\{|n\rangle\}_{n\geq 0}$. A dinâmica efetiva é descrita como um processo de transporte ao longo dessa escada de energia, no qual o sistema pode aumentar a energia, diminuir energia ou permanecer no mesmo nível.

Seja $\wp_t(n)$ a probabilidade de ocupação do $n$-ésimo nível no instante $t$, a evolução das populações é dada por

$$\begin{aligned} \wp_{t+1}(0) &= (p_- + p_0)\wp_t(0) + p_-\,\wp_t(1), \\ \wp_{t+1}(n) &= p_-\,\wp_t(n+1) + p_0\,\wp_t(n) + p_+\,\wp_t(n-1), \end{aligned} \tag{1}$$

onde $p_+$ representa a probabilidade de transição para níveis mais altos, $p_-$ a probabilidade de transição para níveis mais baixos e $p_0$ a probabilidade de permanência no mesmo nível, satisfazendo $p_+ + p_- + p_0 = 1$.

Quando $p_- > p_+$, a dinâmica apresenta uma distribuição estacionária única, dada por

$$\wp_\infty(n) = \frac{p_- - p_+}{p_-}\left(\frac{p_+}{p_-}\right)^n. \tag{2}$$

Para espectros igualmente espaçados, essa distribuição pode ser identificada com uma distribuição de Gibbs, caracterizando a termalização das populações.

### *B. Caminhada quântica em espaço de energia*

Diferentemente das caminhadas quânticas usuais, que empregam um operador moeda, utilizamos uma abordagem baseada em modelos de colisões, no qual o sistema inte-

rage sucessivamente com ancilas preparadas em estados idênticos. Cada ancila codifica os canais elementares de absorção, emissão e permanência através dos estados $\{|+\rangle, |0\rangle, |-\rangle\}$. A cada interação, o sistema pode realizar transições entre níveis vizinhos de energia, permitindo interpretar a dinâmica como uma caminhada quântica discreta sobre a rede formada pelos níveis energéticos.

Seja o estado inicial não correlacionado $\rho \otimes \rho_\mu$, onde $\rho$ denota o estado do sistema e $\rho_\mu$ o estado da ancila. Para a ancila, consideramos uma interpolação entre um estado incoerente e um estado coerente, dada por

$$\rho_\mu = (1-\mu)\rho_{\text{inc}} + \mu\ |\chi\rangle\langle\chi|\,, \qquad 0 \leq \mu \leq 1, \tag{3}$$

onde

$$\rho_{\text{inc}} = \sum_{j\in\{+,0,-\}} p_j\,|j\rangle\langle j|\,, \qquad |\chi\rangle = \sum_{j\in\{+,0,-\}} \sqrt{p_j}\,|j\rangle\,, \tag{4}$$

com $p_+ + p_- + p_0 = 1$. A evolução efetiva do sistema é então descrita pelo mapa completamente positivo e traço preservante (CPTP)

$$\Phi_\mu(\rho) = \text{Tr}_A\left[U\,(\rho\otimes\rho_\mu)\,U^\dagger\right], \tag{5}$$

onde $\mu$ parametriza o grau de coerência presente no estado da ancila. O operador $U$ representa a evolução unitária conjunta sistema–ancila, e o traço parcial é tomado sobre os graus de liberdade da ancila.

A característica central do modelo é que o mapa pode ser decomposto como

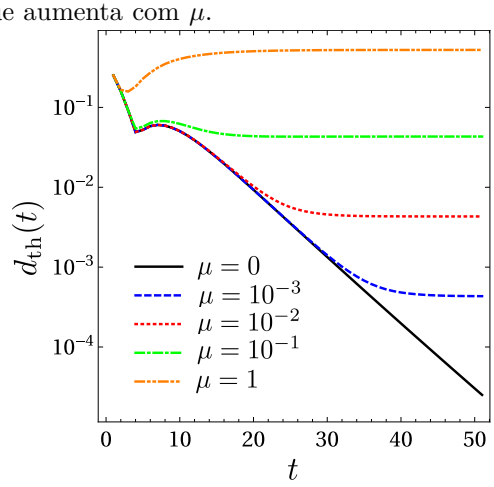
$$\Phi_\mu = \Phi_0 + \Phi_{\text{coh}}, \tag{6}$$

onde $\Phi_0$ reproduz exatamente a dinâmica clássica em espaço de energia, enquanto $\Phi_{\text{coh}}$ é responsável pela geração de coerências entre níveis de energia. Como essa contribuição atua exclusivamente sobre os elementos fora da diagonal da operador densidade, a evolução das populações permanece idêntica àquela do processo clássico, independentemente do valor de $\mu$. Dessa forma, o modelo permite investigar separadamente a dinâmica das populações e das coerências quânticas.

## III. Resultados

Para investigar se há convergência das populações para a distribuição de Gibbs, implicando em termalização, comparamos o estado evoluído $\rho_t$ com o estado de Gibbs $\rho_{\beta_t}$ associado à energia instantânea do sistema. A proximidade entre esses estados é

**Fig. 1.** Evolução temporal da distância térmica $d_{\mathrm{th}}(t)$ para diferentes valores do parâmetro de coerência $\mu$. Para $\mu = 0$, a dinâmica se reduz ao caso clássico e $d_{\mathrm{th}} \to 0$, enquanto que para $\mu > 0$, a distância satura para um valor finito que aumenta com $\mu$.




quantificada pela distância térmica

$$d_{\mathrm{th}}(t) = \frac{1}{2} \left\| \rho_t - \rho_{\beta_t} \right\|_1 , \tag{7}$$

onde $\| \cdot \|_1$ denota a norma traço. Essa quantidade fornece uma medida operacional da distinguibilidade entre o estado do sistema e o estado de equilíbrio térmico. Em particular, quando $d_{\mathrm{th}}(t) \to 0$, os estados tornam-se indistinguíveis e, consequentemente, $\rho_t$ converge para $\rho_{\beta_t}$. Nesse caso, dizemos que o sistema termaliza.

Na Figura 1, analisamos a evolução temporal da distância térmica para diferentes valores do parâmetro de coerência $\mu$. Em tempos curtos, a dinâmica permanece próxima do comportamento clássico para todos os valores de $\mu$. Em tempos longos, entretanto, observa-se uma separação entre as curvas, com maiores valores de $\mu$ produzindo desvios assintóticos mais pronunciados em relação ao estado térmico. Apesar disso, a distância térmica converge para um valor constante em todos os casos, indicando a existência de um estado de equilíbrio assintótico. Assim, embora a dinâmica equilibre para qualquer valor de $\mu$, a presença de coerências impede, em geral, que esse estado de equilíbrio coincida com o estado térmico de Gibbs.

Portanto, as coerências geradas por $\Phi_{\mathrm{coh}}$ durante a evolução persistem em tempos longos, impedindo a convergência do estado quântico completo para o estado térmico. Esse resultado decorre de uma análise perturbativa em $\mu$, truncada em segunda ordem. Como consequência, a distância térmica satura em um valor constante após um regime transiente, indicando a existência de um estado de equilíbrio assintótico. Para $\mu > 0$, contudo, esse estado de equilíbrio difere do estado térmico de Gibbs, caracterizando um processo de equilibração sem termalização.

## IV. Conclusões

Neste trabalho investigamos processos de termalização por meio de caminhadas quânticas no espaço de energia. Mostramos que as populações convergem para a distribuição de Gibbs, enquanto coerências persistentes impedem a convergência do estado quântico completo para o estado térmico. Esses resultados evidenciam uma distinção fundamental entre termalização das populações e convergência do operador densidade, fornecendo uma perspectiva alternativa para o estudo da relação entre coerência, transporte em espaço de energia e irreversibilidade.


## Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. R. M. A. agradece ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Grant nº 305957/2023-6.


## Referências


GOGOLIN, C.; EISERT, J. Equilibration, thermalisation, and the emergence of statistical mechanics in closed quantum systems. **Reports on Progress in Physics**, v. 79, n. 5, p. 056001, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1088/0034-4885/79/5/056001>.

KEMPE, J. Quantum random walks: An introductory overview. **Contemporary Physics**, Taylor & Francis, v. 44, n. 4, p. 307–327, 2003. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/00107151031000110776>.

POPESCU, S.; SHORT, A. J.; WINTER, A. Entanglement and the foundations of statistical mechanics. **Nature Physics**, v. 2, n. 11, p. 754–758, 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/nphys444>.

ZUREK, W. H. Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, 2003. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.75.715>.