Universidade de São Paulo

Instituto de Física

A Evolução Temporal de Sistemas de Spins 1/2 Congelados no Espaço Descritos pelo Modelo de Heisenberg

Marcelo Meireles dos Santos

Dissertação de mestrado apresentada ao
Instituto de Física para a obtenção
do título de Mestre em Ciências

Orientador: Prof. Dr. Dmitri Maximovitch Gitman

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Dmitri Maximovitch Gitman (IFUSP)

Prof. Dr. Josif Frenkel (IFUSP)

Prof. Dr. Nami Fux Svaiter (CBPF)

São Paulo
2012

Resumo

Este projeto se destina ao estudo de sistemas quânticos não relativísticos de dois, quatro e oito níveis de energia que descrevem partículas com spin s=1/2 sujeitas à ação de campos externos e interagentes entre si. São apresentadas soluções exatas para as equações que regem esses sistemas. Tais sistemas possuem uma vasta aplicação em diversas áreas da física, dentre as quais é possível destacar a computação quântica. Possíveis aplicações dos resultados são a construção de portas lógicas quânticas universais. Estas portas lógicas quânticas representam um elemento essencial no desenvolvimento dos chamados computadores quânticos. A análise e a implementação destes computadores quânticos exige a manipulação de sistemas de varios níveis, sujeitos a campos externos dependentes do tempo. Neste trabalho é apresentada a solução para o assim chamado Problema de Rabi, um particular problema de dois níveis. Um exemplo de solução para o sistema de quatro níveis, aqui relativo a um problema de dois spins também é discutido. Foram obtidas soluções exatas para sistemas de oito níveis cuja possível aplicação é a Correção Quântica de Erros.

Abstract

This project aims to study the non-relativistic quantum systems of two, four and eight energy levels that describe particles with spin s=1/2 in external fields and interacting with each other. We find exact analitical solutions for these systems. Such systems have extensive applications in various areas of physics, among which it's possible to highlight quantum computing. Possible applications of the results are the construction of quantum universal logic gates.These quantum logic gates are an essential element in the development of so-called quantum computers. The analysis and implementation of quantum computers requires handling systems of various levels, subject to time-dependent external fields. This work presents a solution to the so-called Rabi problem, a particular problem at two levels. An example of a solution to the system of four levels, related to two spins problem is also investigated. We obtained exact solutions for systems of eight levels with possible application to the Quantum Error Correction.

Agradecimentos

Ao meu orientador Professor Dr. Dmitri M. Gitman e a todos os professores do Instituto de Física da USP que contribuíram para a minha formação.

Ao Professor Dr. Mário César Baldiotti, colaborador do Grupo Quanta, pelas discussões nada menos que imprescindíveis à pesquisa aqui abordada e também por seu papel motivacional.

Ao também colaborador do grupo, Prof. Dr. Alexander Levin pelas discussões utilíssimas e por sua prestatividade.

Aos professores Josif Frenkel e Nami Fux Svaiter pelas valiosas sugestões dadas.

À Lydiane P. Ramos pelo afeto.

Em especial ao Ricardo Araújo Pinto pela amizade e apoio.

Ao Tiago Adorno, Bruno Lima, João Luis Meloni Assirati e Rodrigo Fresneda pela amizade e discussões técnicas.

Aos amigos Gustavo Flório Bernardi, Benedito Silva Abreu, Alexandre César dos Santos, Emanuel Gabriel, Tiago Ribeiro Severino, Edmilson dos Santos Macedo, Alberto Pereira, Caio Vinícius Costa Lopes, Ricky Costa, Ignat Fialkovskiy, Michel Lacerda Marcondes dos Santos, André Luiz e aos inúmeros amigos no IFUSP e outros institutos.

Eu, enquanto homem, não existo somente como criatura individual,
mas me descubro membro de uma grande comunidade humana.
Ela me dirige, corpo e alma, desde o nascimento até a morte.
Meu valor consiste em reconhecê-lo. Sou realmente um homem quando
meus sentimentos, pensamentos e atos têm uma única finalidade:
a comunidade e o seu progresso. Minha atitude social, portanto,
determinará o juízo que têm sobre mim, bom ou mal.
Albert Einstein

Dedico este trabalho ao meu pai
Cicero Bezerra dos Santos.

Sumário

Capítulo 1

Introdução

Sistemas quânticos de níveis (de energia) finitos tem um papel muito importante na física contemporânea. Neste trabalho são apresentadas soluções exatas para as equações que regem a dinâmica de certos sistemas de dois, quatro e oito níveis. Obtivemos a evolução temporal de sistemas não relativísticos de uma cadeia linear de spins 1/2 interagentes entre si, congelados no espaço e sujeitos a campos magnéticos externos. Tais sistemas foram descritos pelo modelo de Heisenberg [1]. Em particular trabalhamos aqui com sistemas de até três corpos e as correspondentes equações de Schrödinger que regem estes sistemas são aqui chamadas Equação de Spin [2], Equação de Dois Spins [3] e, finalmente, a Equação de Três Spins.

Os sistemas de dois, quatro e até mesmo de oito níveis têm atraído cada vez mais atenção devido à sua relação com o problema da computação quântica, veja e.g. [4], [5]. Na teoria da informação quântica, o estado de cada *bit* da computação convencional é substituído por qualquer estado quântico de um *qubit* (abreviação para o termo da língua inglesa *quantum bit*), que pode ser considerado como um sistema de dois níveis de energia. Computação é realizada por meio da manipulação desses *qubits* com a ajuda das assim chamadas portas quânticas. Embora estas portas dependam do número de *qubits* envolvidos, é possível demonstrar que todas manipulações podem ser eficientemente realizadas usando portas com somente um e dois *qubits*, onde portas de dois *qubits* podem ser identificadas com um sistema de quatro níveis. Por estas razões, sistemas de dois e quatro níveis são elementos cruciais dos possíveis computadores quânticos. Não obstante, sistemas de 8 níveis são importantes para a implementação de algoritmos de correção quântica de erros [4]. Mais sobre algoritmos quânticos pode ser visto em [6], [7] e [8].

Os mais recentes avanços experimentais com respeito à manipulação de spins em pontos quânticos (dopantes em Si, vacâncias no diamante carregadas de nitrogênio, entre outros) são descritos em um recente resumo [9].

Na sequência é feita uma descrição de como este manuscrito está organizado.

No Capítulo 2 apresentamos a forma geral da Hamiltoniana dos sistemas de níveis finitos aqui estudados e introduzimos a notação usada neste trabalho. Discutimos o operador de evolução temporal e apresentamos as equações que regem a dinâmica de sistemas de spins 1/2 congelados no espaço, descritos pelo modelo de Heisenberg.

Apresentamos no Capítulo 3, soluções explícitas para sitemas de dois e quatro níveis. Em particular apresantamos a solução para o então chamado problema de Rabi e para um problema de dois spins, não interagentes entre si neste caso, imersos em campos magnéticos externos paralelos.

Já no Capítulo 4 obtemos o operador de evolução temporal para sistemas de oito níveis para diferentes configurações de campos magnéticos externos e de interações entre os spins. Em particular a simetria esférica dos operadores de interação entre as partículas permitiu o uso do método de sistemas de coordenadas girantes [11] na resolução do análogo para o problema de Rabi para três spins. Num dos casos estudado neste capítulo usamos o método de diagonalização conhecido como o *Ansatz de Bethe* [12].

No Capítulo 5 fazemos algumas considerações finais do trabalho.

Nos apêndices nós apresentamos algumas propriedades da função exponencial, listamos importantes propriedades relativas ao produto de Kronecker, além de alguns resultados algébricos importantes no desenvolvimento desta obra.

Capítulo 2

Dinâmica Quântica

Apresentamos aqui a forma geral da Hamiltoniana dos sistemas de níveis (de energia) finitos aqui estudados e introduzimos a notação usada neste trabalho. Também apresentamos as equações que regem a dinâmica de sistemas de spins 1/2 congelados no espaço, descritos pelo modelo de Heisenberg.

2.1 Cadeia Unidimensional de Spins Congelados

Uma cadeia unidimensional de n partículas de spin 1/2 e momento magnético μ (congeladas no espaço) que interagem com os spins mais próximos, comummente chamados de primeiros vizinhos na área de Física do Estado Sólido, imersas em um campo magnético $\mathbf{B}$ (não necessariamente iguais em cada partícula) e acopladas aos vizinhos por uma interação de Heisenberg pode ser descrita pela Hamiltoniana

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{n} \mathbf{F}_i \mathbf{\Sigma}^i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n-1} J_{i(i+1)} \Gamma^{i(i+1)} + \frac{1}{2} J_{1,n} \Gamma^{1n}, \tag{2.1}$$

onde, vide [3], $\mathbf{F} = -\mu \mathbf{B}$.

Define-se aqui que

$$\mathbf{\Sigma}^k = I^{\otimes(k-1)} \otimes \boldsymbol{\sigma} \otimes I^{\otimes(n-k)}, \ \Gamma^{ij} = \mathbf{\Sigma}^i \cdot \mathbf{\Sigma}^j, \tag{2.2}$$

$$I = [I]_{2\times 2}, \ \mathbf{B}_i = \mathbf{B}_i(t), \tag{2.3}$$

onde I é a matriz identidade 2×2, $I^{\otimes n}$ é o produto tensorial de n matrizes I, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ são as matrizes de Pauli, $\mathbf{B}_i = \mathbf{B}_i(t)$ o campo magnético no i-ésimo spin e $J_{ij} = J_{ij}(t)$ a função de interação entre os vizinhos i e j. O caso $J_{1,n} \neq 0$ caracteriza uma cadeia circular, enquanto que $J_{1,n} = 0$ uma cadeia linear.

Algumas importantes regras de comutação e anti-comutação são:

$$\left[\Sigma_i^m, \Sigma_j^n\right] = 2i\delta_{mn}\varepsilon_{ijk}\Sigma_k^m, \quad \left[\Sigma_i^m, \Sigma_j^m\right]_+ = 2\delta_{ij}. \tag{2.4}$$

Além disso, apesar de Γ^{mn} não comutar nem com $\mathbf{\Sigma}^m$ nem com $\mathbf{\Sigma}^n$, usando as relações de comutação acima é possível ver que

$$[\Gamma^{mn}, \mathbf{\Sigma}^m + \mathbf{\Sigma}^n] = 0. \tag{2.5}$$

Como consequência qualquer Γ^{jk}, e portanto a interação entre as partículas, comuta com uma rotação $\mathcal{R}_{\mathbf{n}}$ em qualquer direção $\hat{\mathbf{n}}$,

$$\left[\Gamma^{jk}, \mathcal{R}_{\mathbf{n}}\right] = 0, \tag{2.6}$$

$$\mathcal{R}_{\mathbf{n}}(\theta) = \exp\left(-\frac{i\theta}{2}\hat{\mathbf{n}}\cdot\sum_{i=1}^{n}\mathbf{\Sigma}^{i}\right) = \prod_{k=1}^{n}\exp\left(-\frac{i\theta}{2}\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{\Sigma}^{k}\right). \tag{2.7}$$

Os artigos [2], [3] e [16] apresentam algumas soluções para os casos de $n = 1$ e $n = 2$ partículas submetidas a diferentes configurações de campos externos.

Como a solução geral para este problema (um sistema de N spins descrito pela Hamiltoniana 2.1) não é conhecida, a proposta principal deste trabalho foi buscar soluções exatas para um sistema de $n = 3$ partículas para o maior número de casos possíveis, ou seja, para partículas sujeitas a diferentes configurações de campos magnéticos e de interações entre si. Naturalmente, por buscar soluções exatas leia-se determinar o operador evolução temporal uma vez que se a representação deste operador (em alguma base) é conhecida para uma dada Hamiltoniana, então conhece-se a evolução do estado em qualquer instante de tempo t dado o estado inicial (ou equivalentemente as condições iniciais), o que é sintetizado na equação

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)\,|\Psi(t_0)\rangle\,, \tag{2.8}$$

onde $\hat{U}(t,t_0)$ é o operador evolução temporal. De fato, $\hat{U}(t,t_0)$ é uma isometria e leva o estado inicial $|\Psi(t_0)\rangle$ ao estado $|\Psi(t)\rangle$ em um tempo arbitrário.

2.2 Operador Evolução Temporal

Na descrição não-relativística da mecânica quântica, o operador de evolução temporal deve obedecer, vide e.g. [17], à equação diferencial

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0). \tag{2.9}$$

Esta é a *equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal.* As soluções formais para essa equação são tratadas em três diferentes casos.

Caso 1. O operador Hamiltoniano é independente do tempo:

$$\hat{U}(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\,(t-t_0)\right]. \tag{2.10}$$

Caso 2. O operador Hamiltoniano é dependente do tempo mas os $H's$ em tempos diferentes comutam:

$$\hat{U}(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}(\tau)d\tau\right]. \tag{2.11}$$

Caso 3. Os $H's$ em tempos diferentes não comutam:

$$\hat{U}(t,t_0) = \hat{1} + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^{n}\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}}dt_n\hat{H}(t_1)\hat{H}\,(t_2)\cdots\hat{H}\,(t_n) \tag{2.12}$$

A obtenção dessas soluções é feita, por exemplo, em [18].

2.3 A Equação de Spin

Associado às partículas de spin $s = 1/2$, um particular caso dos operadores momento é o operador de spin não relativístico $\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$, onde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ são as matrizes de Pauli. De fato[1] $\hat{\mathbf{S}}^2 = s\,(s+1)\,\hbar^2 \overset{(s=1/2)}{=} \frac{3}{4}\hbar^2$.

Seja a base ortonormal ξ_μ, formada por dois possíveis autovetores (mas não os únicos), linearmente independentes e de norma um, do operador de spin na direção S_z , é satisfeita a seguinte equação de autovalores:

$$S_z\xi_\mu = (-1)^{1-\mu}\, s\hbar\xi_\mu\ , \quad \mu = 1,2\ ; \quad \xi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\ , \quad \xi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\ . \tag{2.13}$$

O vetor de estado $\psi(t)$ no espaço de Hilbert dimensão 2 (omitindo-se, no que segue, a notação de Dirac) pode, então, ser escrito como uma combinação linear dos vetores da base ξ_μ , ou seja,

$$\psi(t) = \sum_{\mu=1}^{2} \eta_\mu(t)\xi_\mu \Longrightarrow \psi(t) = \begin{pmatrix} \eta_1(t) \\ \eta_2(t) \end{pmatrix}\ . \tag{2.14}$$

Uma partícula de spin 1/2 sujeita a um campo externo, no caso mais geral dependente do tempo, tem sua dinâmica regida pela equação de Schrödinger com o operador Hamiltoniano $\hat{h}$. Mais adiante serão vistos alguns problemas de muitas partículas descritos pela Hamiltoniana $\hat{H}$ que se reduzem ao problema de uma partícula, por isso que o autor considera o uso de $\hat{h}$ conveniente aqui. A forma geral desta Hamiltoniana, mais uma vez na base ξ_μ, é $\hat{h} = \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F}$, onde $\mathbf{F} = (F^x(t), F^y(t), F^z(t))$ é um dado vetor (no caso mais geral, complexo) dependente do tempo. Além disso, é conveniente se ter em mente que $\mathbf{F}$ deve ter dimensão de energia. A equação de Schrödinger para esse problema é então

$$i\hbar\dot{\psi} = \hat{h}\psi, \quad \psi = \begin{pmatrix} \eta_1(t) \\ \eta_2(t) \end{pmatrix}, \quad \dot{\psi} = \frac{d\psi}{dt}, \quad \hat{h} = \begin{pmatrix} F^z & F^x - iF^y \\ F^x + iF^y & -F^z \end{pmatrix}. \tag{2.15}$$

À equação (2.15) dá-se o nome de *equação de spin*. Ela dá origem a duas equações (acopladas) diferenciais lineares ordinárias de primeira ordem nas funções $\eta_1(t)$ e $\eta_2(t)$:

$$i\hbar\dot{\eta}_1 = F^z\eta_1 + (F^x - iF^y)\,\eta_2\ , \quad i\hbar\dot{\eta}_2 = (F^x + iF^y)\,\eta_1 - F^z\eta_2\ . \tag{2.16}$$

De fato a equação de spin nada mais é que a equação de Schrödinger com a Hamiltoniana (2.1) para $n = 1$ e $J_{ij} = 0$ já que não há interação com outras partículas por tratar-se justamente de um sistema quântico de uma única partícula.

A equação de spin com um campo externo real (magnético) pode ser tratada como uma redução da equação de Pauli [13] ao caso (0+1)-dimensional. Sistemas de dois níveis podem ser descritos por uma equação de spin com uma particular forma de campo externo.

No que segue, a matriz coluna ψ e o vetor $\mathbf{F}$ podem ser chamados de *spinor* e o campo externo, respectivamente.

[1] É comum nos livros-texto de Mecânica Quântica se omitir o operador identidade I em igualdades desse tipo já que não há aqui o risco de confusão pois, naturalmente, uma matriz quadrada de ordem 2 não pode ser igual a um escalar.

2.4 A Equação de Dois Spins

A presente seção é dedicada à apresentação da equação que rege a dinâmica do sistema quântico não relativístico composto por $n = 2$ partículas de spin 1/2, e.g. dois elétrons, interagentes entre si (ainda que a interação de troca entre ambas possa ser *desligada*[2] simplesmente anulando-se a função de interação entre elas, ou seja, fazendo $J(t) = 0$ em (2.1)) e que possuem apenas o grau de liberdade de spin (não têm o grau de liberdade orbital). Cada uma das partículas sofre a ação de um campo magnético externo dependente do tempo no caso mais geral. Os campos em que cada um dos spins está imerso não necessariamente precisam ser iguais entre si, ou seja, as partículas não precisam sentir ao mesmo instante de tempo campos de mesma magnitude e sentido.

O modelo aqui escolhido na tentativa de descrever esse sistema é o *Modelo de Heisenberg* (veja [1]).

Os *spinores*, como já dito outra possível nomenclatura para os vetores de estado de spin, devem ser escritos em termos de alguma base arbitrária. A base aqui escolhida é a *base canônica* composta pelos vetores coluna

$$\varrho_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varrho_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varrho_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varrho_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} . \tag{2.17}$$

É importante notar-se que a base acima nada mais é que o espaço produto-direto (produto este também conhecido como *produto de Kronecker*) dos vetores da base no espaço de spins individuais. Lembrando de (2.13) que $\xi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $\xi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, é possível inferir que

$$\varrho_1 = \xi_1 \otimes \xi_1, \quad \varrho_2 = \xi_1 \otimes \xi_2, \quad \varrho_3 = \xi_2 \otimes \xi_1, \quad \varrho_4 = \xi_2 \otimes \xi_2 . \tag{2.18}$$

O operador de spin total para esse sistema de duas partículas de spin $s = 1/2$ congeladas no espaço é usualmente escrito como $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$, onde

$$\hat{\mathbf{S}}_1 = \left(\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}\right) \otimes I \ , \quad \hat{\mathbf{S}}_2 = I \otimes \left(\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}\right) \tag{2.19}$$

çsão os operadores de spin para o primeiro e segundo sub-sistemas, associados às partículas 1 e 2 respectivamente.

Também aqui I é a matriz identidade 2×2. De fato, I em $\hat{\mathbf{S}}_{1(2)}$ implica em uma operação de identidade no subespaço de spin da partícula 2(1). Além disso, a componente z dos operadores de spin (2.19) acima satisfazem as equações de auto-valores

$$\hat{S}_{1z}\varrho_{1,2} = \frac{\hbar}{2}\varrho_{1,2} \ , \quad \hat{S}_{1z}\varrho_{3,4} = -\frac{\hbar}{2}\varrho_{3,4}$$

$$\hat{S}_{2z}\varrho_{1,3} = \frac{\hbar}{2}\varrho_{1,3} \ , \quad \hat{S}_{2z}\varrho_{2,4} = -\frac{\hbar}{2}\varrho_{2,4}. \tag{2.20}$$

Escrever-se-á, agora, o operador Hamiltoniano para esse sistema de dois spins interagentes como está expresso em (2.1), naturalmente para o particular caso $n = 2$, i.e.,

[2] Poderia-se, assim, descrever um sistema físico real em que os dois pontos quânticos estivessem suficientemente separados de modo que a interação entre eles fosse desprezível.

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{i=1}^{n} \mathbf{F}_i \mathbf{\Sigma}^i + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n-1} J_{i(i+1)}\Gamma^{i(i+1)} + \frac{1}{2}J_{1,n}\Gamma^{1n} = \\ &\overset{(n=2)}{=} \left(\mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{\Sigma}^1 + \mathbf{F}_2 \cdot \mathbf{\Sigma}^2\right) + J_{12}\Gamma^{12}. \end{aligned} \tag{2.21}$$

Na Hamiltoniana (2.21) acima os vetores dependentes do tempo $\mathbf{F}_i = (F_i^x(t), F_i^y(t), F_i^z(t))$, com $i = 1, 2$ neste caso, são os campos externos em cada uma das partículas. O sub-índice i em $\mathbf{F}_i$ especifica em qual das duas partículas atua o respectivo campo. Outrossim, a função de interação de troca de Heisenberg $J_{12} = J(t)$ é, em geral, uma função dependente do tempo também com dimensão de energia assim como $\mathbf{F}_i$.

Pela expressão (2.2) nota-se que, para $n = 2$,

$$\mathbf{\Sigma}^1 = \boldsymbol{\sigma} \otimes I \ , \quad \mathbf{\Sigma}^2 = \ I \otimes \boldsymbol{\sigma} \ , \tag{2.22}$$

$$\Gamma^{12} = \mathbf{\Sigma}^1 \cdot \mathbf{\Sigma}^2 = \Sigma_x^1\Sigma_x^2 + \Sigma_y^1\Sigma_y^2 + \Sigma_z^1\Sigma_z^2 = \sum_{i=1}^{3} \sigma_i \otimes \sigma_i. \tag{2.23}$$

A forma geral para o operador Hamiltoniano $\hat{H}$ é então

$$\hat{H} = (\mathbf{F}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes I \ + \ I \otimes (\mathbf{F}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma}) \ + J\left(\sigma_1 \otimes \sigma_1 + \sigma_2 \otimes \sigma_2 + \sigma_3 \otimes \sigma_3\right). \tag{2.24}$$

Como consequência direta de (2.24), a representação matricial explícita de $\hat{H}(t)$, na base $\varrho_i, \ i = 1, 2, 3, 4$, é

$$\hat{H}(t) = \begin{pmatrix} F_1^z + F_2^z + \frac{J}{2} & F_2^x - iF_2^y & F_1^x - iF_1^y & 0 \\ F_2^x + iF_2^y & F_1^z - F_2^z - \frac{J}{2} & J & F_1^x - iF_1^y \\ F_1^x + iF_1^y & J & F_2^z - F_1^z - \frac{J}{2} & F_2^x - iF_2^y \\ 0 & F_1^x + iF_1^y & F_2^x + iF_2^y & \frac{J}{2} - F_1^z - F_2^z \end{pmatrix}. \tag{2.25}$$

Desse modo, na representação de Schrödinger, a dinâmica quântica desse sistema de dois corpos é governada pelo operador Hamiltoniano (2.25) através da equação de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(t)}{\partial t} = \hat{H}(t)\Psi(t), \quad \Psi(t) = \sum_{\mu=1}^{4} \eta_\mu(t)\varrho_\mu = \begin{pmatrix} \eta_1(t) \\ \eta_2(t) \\ \eta_3(t) \\ \eta_4(t) \end{pmatrix}. \tag{2.26}$$

A equação (2.26) é, de fato, equivalente a um sistema de quatro (também acopladas) equações diferenciais lineares ordinárias de primeira ordem em $\eta_i(t)$, $i = 1, 2, 3, 4$,

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\eta}_1 &= \left(F_1^z + F_2^z + \frac{J}{2}\right)\eta_1 + (F_2^x - iF_2^y)\,\eta_2 + (F_1^x - iF_1^y)\,\eta_3, \\ i\hbar\dot{\eta}_2 &= (F_2^x + iF_2^y)\,\eta_1 + \left(F_1^z - F_2^z - \frac{J}{2}\right)\eta_2 + J\eta_3 + (F_1^x - iF_1^y)\,\eta_4, \\ i\hbar\dot{\eta}_3 &= (F_1^x + iF_1^y)\,\eta_1 + J\eta_2 + \left(F_2^z - F_1^z - \frac{J}{2}\right)\eta_3 + (F_2^x - iF_2^y)\,\eta_4, \\ i\hbar\dot{\eta}_4 &= (F_1^x + iF_1^y)\,\eta_2 + (F_2^x + iF_2^y)\,\eta_3 + \left(\frac{J}{2} - F_1^z - F_2^z\right)\eta_4. \end{aligned} \tag{2.27}$$

Dá-se, assim, às equações (2.26), ou equivalentemente (2.27), o nome *Equação de Dois Spins.*

2.5 A Equação de Três Spins

O objetivo agora é apresentar a aqui chamada *Equação de Três Spins* que é análoga, *mutatis mutandis*, à equação de dois spins discutida na seção anterior.

Considere-se, portanto, um sistema de $n = 3$ partículas de spin $s = 1/2$, de momento magnético de spin μ, congeladas no espaço e cada uma delas imersa num campo magnético externo $\mathbf{B}_i$ onde o sub-índice $i = 1, 2$ ou 3 designa em qual das três partículas atua o respectivo campo.

A base aqui escolhida é mais uma vez a base canônica ζ_i $(i = 1, 2, 3, ..., 8)$ composta pelos vetores coluna

$$\begin{aligned}&\zeta_1 = \xi_1 \otimes \xi_1 \otimes \xi_1, \quad \zeta_2 = \xi_1 \otimes \xi_1 \otimes \xi_2, \quad \zeta_3 = \xi_1 \otimes \xi_2 \otimes \xi_1, \quad \zeta_4 = \xi_1 \otimes \xi_2 \otimes \xi_2,\\ &\zeta_5 = \xi_2 \otimes \xi_1 \otimes \xi_1, \quad \zeta_6 = \xi_2 \otimes \xi_1 \otimes \xi_2, \quad \zeta_7 = \xi_2 \otimes \xi_2 \otimes \xi_1, \quad \zeta_8 = \xi_2 \otimes \xi_2 \otimes \xi_2,\end{aligned} \tag{2.28}$$

onde, por (2.13), $\xi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $\xi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Foi escolhido, portanto, como base para o espaço de estados desse sistema o espaço *produto-direto* dos vetores da base no espaço de uma partícula.

Na base (2.28) a Hamiltoniana que descreve esse sistema de três spins interagentes é escolhida como sendo

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{i=1}^{n} \mathbf{F}_i \boldsymbol{\Sigma}^i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n-1} J_{i(i+1)} \Gamma^{i(i+1)} + \frac{1}{2} J_{1,n} \Gamma^{1n}\\ &= \left(\mathbf{F}_1 \cdot \boldsymbol{\Sigma}^1 + \mathbf{F}_2 \cdot \boldsymbol{\Sigma}^2 + \mathbf{F}_3 \cdot \boldsymbol{\Sigma}^3\right) + \frac{1}{2}\left(J_{12}\Gamma^{12} + J_{23}\Gamma^{23} + J_{13}\Gamma^{13}\right),\end{aligned} \tag{2.29}$$

onde

$$\mathbf{F}_i = -\mu \mathbf{B}_i = \left(F_i^x(t), F_i^y(t), F_i^z(t)\right), \quad i = 1, 2, 3, \tag{2.30}$$

é o campo externo dependente do tempo agindo na i-ésima partícula e $J_{mn} = J_{mn}(t)$ as funções de interação de Heisenberg entre os spins m e n.

Pela expressão (2.2), para $n = 3$, tem-se

$$\boldsymbol{\Sigma}^1 = \boldsymbol{\sigma} \otimes I \otimes I, \quad \boldsymbol{\Sigma}^2 = I \otimes \boldsymbol{\sigma} \otimes I, \quad \boldsymbol{\Sigma}^3 = I \otimes I \otimes \boldsymbol{\sigma}, \tag{2.31}$$

$$\Gamma^{12} = \sum_{i=1}^{3} \sigma_i \otimes \sigma_i \otimes I, \quad \Gamma^{23} = \sum_{i=1}^{3} I \otimes \sigma_i \otimes \sigma_i, \quad \Gamma^{13} = \sum_{i=1}^{3} \sigma_i \otimes I \otimes \sigma_i, \tag{2.32}$$

de modo que a matriz Hamiltoniana (2.29), de ordem 8×8, para esse problema de três corpos fica

$$\begin{aligned}&\hat{H} = (\mathbf{F}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes I \otimes I \; + \; I \otimes (\mathbf{F}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes I \; + \; I \otimes I \otimes (\mathbf{F}_3 \cdot \boldsymbol{\sigma}) \; +\\ &+ \frac{1}{2} J_{12} \sum_{i=1}^{3} \sigma_i \otimes \sigma_i \otimes I \; + \; \frac{1}{2} J_{23} \sum_{i=1}^{3} I \otimes \sigma_i \otimes \sigma_i \; + \; \frac{1}{2} J_{13} \sum_{i=1}^{3} \sigma_i \otimes I \otimes \sigma_i.\end{aligned} \tag{2.33}$$

A evolução no tempo do sistema físico descrito acima é regido, na representação gerada pela base (2.28), pela equação de Schrödinger

$$i\hbar \dot{\Psi} = \hat{H} \Psi, \quad \Psi(t) = \sum_{\mu=1}^{8} \eta_\mu(t) \zeta_\mu = \begin{pmatrix} \eta_1(t) \\ \eta_2(t) \\ \vdots \\ \eta_8(t) \end{pmatrix}. \tag{2.34}$$

É dado aqui o nome *Equação de Três Spins* à equação (2.34) acima. Ela dá origem a um sistema de oito acopladas equações diferenciais lineares ordinárias de primeira ordem nas componentes $\eta_i(t)$.

Essa equação governa, então, a dinâmica desse sistema de 8 níveis e será resolvida para alguns casos particulares no capítulo 4.

Capítulo 3

Soluções para Sistemas de 2 e 4 Níveis

3.1 Introdução

A obtenção de um conjunto completo de portas lógicas quânticas exige a implementação de operadores de um e dois *qubits*, [5], e consequentemente a manipulação de sistemas de dois e quatro níveis de energia. Tais sistemas podem ser realizados, por exemplo, respectivamente através de um sistema de uma e duas partículas de spin 1/2. Dessa forma, a análise das equações (2.15) e (2.26) é um problema de fundamental importância para a computação quântica e permite uma aplicação direta na implementação de portas lógicas quânticas.

3.2 Solução para o Problema de Rabi

O problema de Rabi para um spin consiste em se determinar a evolução temporal de um spin 1/2 sujeito a um particular campo magnético girante cuja forma será explicitada mais adiante.

A correspondente equação de Schrödinger (ou equação de spin) para esse problema é

$$i\hbar\frac{d\psi}{dt} = \hat{h}\psi, \tag{3.1}$$

onde o operador Hamiltoniano que descreve este sistema é

$$\hat{h} = \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F} \quad ,\mathbf{F} = -\mu\mathbf{B} \tag{3.2}$$

com

$$\mathbf{F} = (A\cos\omega t,\ A\sin\omega t,\ A_0)\,, \tag{3.3}$$

denominado aqui *Campo de Rabi*.

A partícula está, portanto, sujeita a um campo magnético externo não estático e, como consequência, o operador Hamiltoniano depende do tempo. Sendo assim, como fora discutido na seção 2.2, se a Hamiltoniana satisfizer a condição $[\hat{H}(t),\hat{H}(t')] = 0 \ \ \forall \ \ t,t'$, ou seja, se ela comutar consigo mesma mesmo em instantes de tempos diferentes, então o operador evolução temporal assumiria a forma (2.11) $\hat{U}(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}(\tau)d\tau\right]$ e o problema de resolver a equação de spin (2.15) se resumiria ao de encontrar a forma explícita de uma exponencial matricial, tarefa esta que pode ser não trivial e árdua, por vezes impossível na atualidade.

Mas, como será mostrado a seguir, a condição de comutatividade em tempos diferentes **não** é satisfeita nesse caso.

De fato,

$$\begin{aligned}
\left[\hat{H}(t), \hat{H}(t')\right] &= \left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F}(t)),\ (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F}(t'))\right] = \\
&= \left[F^x(t)\sigma_1 + F^y(t)\sigma_2 + F^z(t)\sigma_3,\ F^x(t')\sigma_1 + F^y(t')\sigma_2 + F^z(t')\sigma_3\right] = \\
&= \underbrace{\left[F^x(t)\sigma_1,\ F^x(t')\sigma_1\right]}_{=0} + \left[F^x(t)\sigma_1,\ F^y(t')\sigma_2\right] + \left[F^x(t)\sigma_1,\ F^z(t')\sigma_3\right] + \\
&+ \left[F^y(t)\sigma_2,\ F^x(t')\sigma_1\right] + \underbrace{\left[F^y(t)\sigma_2,\ F^y(t')\sigma_2\right]}_{=0} + \left[F^y(t)\sigma_2,\ F^z(t')\sigma_3\right] + \\
&+ \left[F^z(t)\sigma_3,\ F^x(t')\sigma_1\right] + \left[F^z(t)\sigma_3,\ F^y(t')\sigma_2\right] + \underbrace{\left[F^z(t)\sigma_3,\ F^z(t')\sigma_3\right]}_{=0} = \\
&= F^x(t)F^y(t')\left[\sigma_1,\ \sigma_2\right] + F^x(t)F^z(t')\left[\sigma_1,\ \sigma_3\right] + F^y(t)F^x(t')\left[\sigma_2,\ \sigma_1\right] + \\
&+ F^y(t)F^z(t')\left[\sigma_2,\ \sigma_3\right] + F^z(t)F^x(t')\left[\sigma_3,\ \sigma_1\right] + F^z(t)F^y(t')\left[\sigma_3,\ \sigma_2\right] \neq 0,
\end{aligned} \tag{3.4}$$

em geral, quando $t \neq t'$.

Para o leitor concluir a desigualdade acima basta se ter em mente que $\mathbf{F}(t) = (A\cos\omega t,\ A\sin\omega t,\ A_0)$ e naturalmente $\mathbf{F}(t') = (A\cos\omega t',\ A\sin\omega t',\ A_0)$.

Tem-se aqui então que o comutador de $\hat{H}(t)$ com $\hat{H}(t')$ não é nulo para quaisquer t, t'. O operador evolução temporal **não** pode, portanto, ser escrito como

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \hat{H}(\tau)d\tau\right].$$

Faz-se necessário, então, lançar mão de algum outro método na tentativa de se solucionar esse problema (quem o fez pela primeira vez foi Rabi [10], [11]). A obtenção de $\hat{U}(t, t_0)$ pelo cálculo direto da série de Dyson (2.12) poderia ser um caminho, mas como será visto não se fará necessária.

A equação de spin original é $\hat{h}\psi = i\hbar\frac{d\psi}{dt}$ com $\hat{h} = \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F}$ e com o campo externo girante $\mathbf{F} = (A\cos\omega t,\ A\sin\omega t,\ A_0)$ onde $A,\ A_0$ e ω são constantes reais. Uma tentativa natural de resolver este problema é fazer uma mudança de coordenadas no sistema com o intuito de que a nova Hamiltoniana $\hat{h}'$ (a Hamiltoniana no espaço transformado) seja independente do tempo e possivelmente mais simples de ser tratada analiticamente. Uma vez determinada a evolução do sistema físico no novo sistema de coordenadas é possível retornar ao problema original e calcular o vetor de estado de spin

$$\psi(t) = \hat{U}(t, t_0)\psi(t_0) \tag{3.5}$$

para um instante de tempo arbitrário.

No espaço de Hilbert bi-dimensional uma rotação de um vetor de estado[1] por um ângulo ϕ sobre o eixo z é escrita como

$$\mathcal{D}_z(\phi) = \exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right). \tag{3.6}$$

[1]Dependendo dos pontos de vista passivo ou ativo pode-se considerar tanto spinor rodado (sistema físico rodado) como sistema de coordenadas rodado.

Devido à dependência angular das componentes F^x e F^y no campo externo.(3.3), faz-se convenientemente aqui $\phi = \omega t$ e lembrando que o operador de spin não-relativístico é $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$, segue que

$$\mathcal{D}_z(\omega t) = \exp\left(\frac{-iS_z\omega t}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{-i\hbar\sigma_3\omega t}{2\hbar}\right) = \exp\left(\frac{-i\sigma_3\omega t}{2}\right) \equiv \mathcal{R}_z(t). \tag{3.7}$$

No que segue chamar-se-á a operação de *rotação* acima de $\mathcal{R}_z(t)$.

Escrevendo agora o spinor $\psi(t)$ em função de $\phi(t)$, onde $\phi(t)$ é o spinor no espaço transformado, com ambos os vetores de estados conectados via uma transformação $\mathcal{R}_z(t)$, tem-se

$$\psi(t) = \mathcal{R}_z(t)\phi(t). \tag{3.8}$$

A partir da equação (3.7) é possível notar que a transformação $\mathcal{R}_z(t)$, uma matriz 2×2, goza das propriedades de *inversibilidade*, de modo que

$$\phi(t) = \mathcal{R}_z^{-1}(t)\psi(t), \tag{3.9}$$

de *unitariedade*,

$$\mathcal{R}_z^\dagger\mathcal{R}_z = \mathcal{R}_z\mathcal{R}_z^\dagger = I, \tag{3.10}$$

de modo a garantir a conservação de probabilidade e, finalmente, de *se reduzir à operação identidade em* $t = t_0 = 0$, de maneira que

$$\mathcal{R}_z(t = 0) = I. \tag{3.11}$$

Assim, o lado direito da equação (3.1) fica

$$\hat{h}\psi = \hat{h}\left(\mathcal{R}_z\phi\right), \tag{3.12}$$

enquanto que o lado esquerdo passa a ser

$$i\hbar\frac{d\psi}{dt} = i\hbar\frac{d\left(\mathcal{R}_z\phi\right)}{dt} = i\hbar\left(\dot{\mathcal{R}}_z\phi + \mathcal{R}_z\dot{\phi}\right). \tag{3.13}$$

A próxima expressão é obtida igualando-se as duas equações anteriores, que acarreta

$$\hat{h}\left(\mathcal{R}_z\phi\right) = i\hbar\left(\dot{\mathcal{R}}_z\phi + \mathcal{R}_z\dot{\phi}\right), \tag{3.14}$$

ou

$$\left(\hat{h}\mathcal{R}_z - i\hbar\dot{\mathcal{R}}_z\right)\phi = i\hbar\mathcal{R}_z\dot{\phi}. \tag{3.15}$$

Agora, multiplicando à esquerda os dois lados da última igualdade pela inversa de $\mathcal{R}_z(t)$ obtém-se que

$$\mathcal{R}_z^{-1}\left(\hat{h}\mathcal{R}_z - i\hbar\dot{\mathcal{R}}_z\right)\phi = i\hbar\underbrace{\mathcal{R}_z^{-1}\mathcal{R}_z}_{=I}\dot{\phi}, \tag{3.16}$$

ou seja,

$$\underbrace{\left(\mathcal{R}_z^{-1}\hat{h}\mathcal{R}_z - i\hbar\mathcal{R}_z^{-1}\dot{\mathcal{R}}_z\right)}_{=\hat{h}'}\phi = i\hbar\dot{\phi}. \tag{3.17}$$

Percebe-se, portanto, que o vetor de estado de spin $\phi(t) = \mathcal{R}_z^{-1}(t)\psi(t)$ é solução para uma nova equação de spin, a saber

$$\hat{h}'\phi = i\hbar\frac{d\phi}{dt}, \tag{3.18}$$

com $\hat{h}'$ sendo

$$\hat{h}' = \mathcal{R}_z^{-1}\hat{h}\mathcal{R}_z - i\hbar\mathcal{R}_z^{-1}\dot{\mathcal{R}}_z. \tag{3.19}$$

O primeiro termo do lado direito de (3.19) é

$$\begin{aligned}\mathcal{R}_z^{-1}\hat{h}\mathcal{R}_z &= \exp\left(\frac{i\sigma_3\omega t}{2}\right)\underbrace{\left[A\left(\cos\omega t\right)\sigma_1 + A\left(\sin\omega t\right)\sigma_2 + \ A_o\sigma_3\right]}_{=\hat{h}=\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F}}\exp\left(\frac{-i\sigma_3\omega t}{2}\right) \\ &= A\sigma_1 + A_0\sigma_3. \end{aligned} \tag{3.20}$$

Relativo ao segundo termo, tem-se que a derivada temporal do operador de rotação $\mathcal{R}_z(t) = \exp\left(\frac{-i\sigma_3\omega t}{2}\right)$ é

$$\dot{\mathcal{R}}_z(t) = \frac{-i\sigma_3\omega}{2}\exp\left(\frac{-i\sigma_3\omega t}{2}\right). \tag{3.21}$$

Como consequência,

$$i\hbar\mathcal{R}_z^{-1}\dot{\mathcal{R}}_z = i\hbar\exp\left(\frac{i\sigma_3\omega t}{2}\right)\frac{-i\sigma_3\omega}{2}\exp\left(\frac{-i\sigma_3\omega t}{2}\right) = \frac{\hbar\omega}{2}\sigma_3. \tag{3.22}$$

Finalmente, de (3.20) e (3.22), a expressão para o operador Hamitoniano (3.19) no espaço transformado é

$$\hat{h}' = \mathcal{R}_z^{-1}\hat{h}\mathcal{R}_z - i\hbar\mathcal{R}_z^{-1}\dot{\mathcal{R}}_z = A\sigma_1 + \left(A_0 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)\sigma_3, \tag{3.23}$$

onde as constantes A e A_0 têm dimensão de energia.

De fato, o novo operador Hamiltoniano $\hat{h}'$ é independente do tempo de maneira que a solução da equação de Schrödinger (2.9) para o operador de evolução temporal $\hat{U}'(t,t_0)$, que satisfaz

$$\phi(t) = \hat{U}'(t,t_0)\phi(t_0), \tag{3.24}$$

é

$$\hat{U}'(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{h}'\left(t-t_0\right)\right]. \tag{3.25}$$

Por simplicidade é assumido que $t_0 = 0$.

Antes de se calcular o operador evolução $\hat{U}'(t,t_0)$, é importante anunciar o seguinte resultado cuja demonstração é feita no Apêndice A.

Seja $M \in \mathrm{Mat}(\mathcal{C},n)$ uma matriz $n\times n$ com entradas complexas e x um número real. Um particular caso em que cálculo da forma exata de uma exponencial matricial do tipo $\exp\left(iMx\right)$ pode ser facilmente computado, é o caso em que o quadrado de M é igual à matriz identidade, i.e., $M^2 = I$. Se esta última condição for satisfeita tem-se a seguinte igualdade

$$\exp\left(iMx\right) \overset{\left(M^2=I\right)}{=} I\cos x + iM\sin x. \tag{3.26}$$

Se acontecer de $\left(\hat{h}'\right)^2$ ser proporcional à matriz identidade, poder-se-á usar a propriedade acima. De fato é o que acontece, pois

$$
\left(\hat{h}'\right)^2 \overset{(3.23)}{=} \left[A\sigma_1 + \left(A_0 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)\sigma_3\right]\left[A\sigma_1 + \left(A_0 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)\sigma_3\right] =
$$

$$
= A^2\underbrace{(\sigma_1)^2}_{=I} + A\left(A_0 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)\underbrace{[\sigma_1, \sigma_3]_+}_{=0} + \left(A_0 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)^2\underbrace{(\sigma_3)^2}_{=I} = \left[A^2 + \left(A_0 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)^2\right] I. \tag{3.27}
$$

No cálculo acima utilizou-se as bem conhecidas relações de comutação e anti-comutação relativas às matrizes de Pauli,

$$
[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k,\ [\sigma_i, \sigma_j]_+ = 2\delta_{ij}. \tag{3.28}
$$

onde ϵ_{ijk} é o símbolo de Levi-Civita.

De posse da igualdade

$$
\left(\hat{h}'\right)^2 = \left[A^2 + \left(A_0 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)^2\right] I, \tag{3.29}
$$

tem-se, então, que

$$
\begin{aligned}
\hat{U}'(t, t_0) &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{h}'(t - t_0)\right] = \\
&= \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\underbrace{\left[\frac{\hat{h}'}{\sqrt{A^2 + \left(A_0 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)^2}}\right]}_{=M}\sqrt{A^2 + \left(A_0 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)^2}(t - t_0)\right\} \\
&= I\cos\left(\frac{\sqrt{A^2 + \left(A_0 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)^2}(t - t_0)}{\hbar}\right) - iM\sin\left(\frac{\sqrt{A^2 + \left(A_0 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)^2}(t - t_0)}{\hbar}\right)
\end{aligned} \tag{3.30}
$$

onde definiu-se

$$
M \equiv \frac{\hat{h}'}{\sqrt{A^2 + \left(A_0 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)^2}} = \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F}}{\sqrt{A^2 + \left(A_0 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)^2}} = \frac{A(\cos\omega t)\sigma_1 + A(\sin\omega t)\sigma_2 + A_0\sigma_3}{\sqrt{A^2 + \left(A_0 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)^2}}. \tag{3.31}
$$

A expressão $\omega_R^2 \equiv A^2 + \left(A_0 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)^2$ define a frequência de Rabi ω_R.

Como já mencionado, a evolução do estado de spin $\phi(t)$, associado à Hamiltoniana $\hat{h}'$, é dada por $\phi(t) = \hat{U}'(t, t_0)\phi(t_0)$, onde o operador evolução temporal no espaço transformado $\hat{U}'(t, t_0)$ é dado em (3.30) e uma vez que sua representação explícita, na base (2.13), fora determinada, o próximo passo é dizer qual sua relação com $\hat{U}(t, t_0)$, o operador evolução do problema original.

$$
\psi(t) = \mathcal{R}_z(t)\phi(t) \overset{(3.24)}{=} \mathcal{R}_z(t)\underbrace{\left[\hat{U}'(t, t_0)\phi(t_0)\right]}_{=\phi(t)} \overset{(3.9+3.5)}{=} \underbrace{\mathcal{R}_z(t)\hat{U}'(t, t_0)\mathcal{R}_z^{-1}(t_0)}_{=\hat{U}(t,t_0)}\psi(t_0), \tag{3.32}
$$

pois, pela equação (3.9), $\phi(t) = \mathcal{R}_z^{-1}(t)\psi(t)$ e, por (3.5) $\psi(t) = \hat{U}(t, t_0)\psi(t_0)$. Portanto

$$
\hat{U}(t, t_0) = \mathcal{R}_z(t)\hat{U}'(t, t_0)\mathcal{R}_z^{-1}(t_0). \tag{3.33}
$$

Além disso, ocorre que $\mathcal{R}_z^{-1}(t_0) = I$ e a solução para o problema de Rabi para um spin é, finalmente,

$$\hat{U}(t,t_0) = \mathcal{R}_z(t)\hat{U}'(t,t_0) \tag{3.34}$$

onde $\mathcal{R}_z(t)$ e $\hat{U}'(t,t_0)$ são (3.7) e (3.30) respectivamente.

O método da utilização de um sistema de coordenadas girantes neste problema de Rabi, será útil também na resolução do análogo do problema de Rabi para três spins devido à simetria esférica da interação as partículas. Tal caso será abordado na seção 4.4 .

3.3 Exemplo de Solução para um Sistema de 4 Níveis

Na presente seção é resolvida, como ilustração, a *Equação de Dois Spins* (2.26) para o caso de duas partículas imersas em campos magnéticos externos paralelos, em geral dependentes do tempo. No caso aqui tratado os dois corpos não interagem entre si.

No caso mais geral, o operador Hamiltoniano que descreve aqui dois spins 1/2 congelados no espaço, interagentes entre si via uma função de interação de Heisenberg J dependente do tempo, e que sofrem individualmente a ação de um campo magnético externo não necessariamente estático pode ser escrito como em (2.21),

$$\begin{aligned}\hat{H} \;&=\; \sum_{i=1}^{n}\mathbf{F}_i\boldsymbol{\Sigma}^i + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n-1}J_{i(i+1)}\Gamma^{i(i+1)} + \frac{1}{2}J_{1,n}\Gamma^{1n}\\ &\overset{(n=2)}{=} \left(\mathbf{F}_1\cdot\boldsymbol{\Sigma}^1 + \mathbf{F}_2\cdot\boldsymbol{\Sigma}^2\right) + J\Gamma^{12}.\end{aligned} \tag{3.35}$$

Aqui é apresentado o particular caso em que as partículas (não interagentes entre si, $J_{12} = J = 0$) estão sujeitas a diferentes campos externos dependentes do tempo com a mesma direção fixa. Escolhe-se então, sem perda de generalidade, um sitema de coordenadas apropriado tal que

$$\mathbf{F}_1(t) = (0,0,F_1(t)),\;\; \mathbf{F}_2(t) = (0,0,F_2(t)). \tag{3.36}$$

Essas condições na expressão para o operador Hamiltoniano (3.35) implica em

$$\hat{H}(t) = F_1(t)\Sigma_z^1 + F_2(t)\Sigma_z^2, \tag{3.37}$$

onde, pelas igualdades (2.22)

$$\Sigma_z^1 = \sigma_3\otimes I,\quad \Sigma_z^2 = \; I\otimes\sigma_3, \tag{3.38}$$

de maneira que

$$\hat{H} = (F_1(t)\sigma_3)\otimes I + I\otimes(F_2(t)\sigma_3). \tag{3.39}$$

A matriz Hamiltoniana acima tem a propriedade de comutar consigo mesma em instantes de tempos diferentes, ou melhor

$$\left[\hat{H}(t),\hat{H}(t')\right] = 0 \;\;\forall\;\; t,t', \tag{3.40}$$

pois

$$\left[\hat{H}(t),\hat{H}(t')\right] = \left[(F_1(t)\sigma^3)\otimes I + I\otimes(F_2(t)\sigma^3),\;(F_1(t')\sigma^3)\otimes I + I\otimes(F_2(t')\sigma^3)\right]$$

$$= [(F_1(t)\sigma^3) \otimes I,\ (F_1(t')\sigma^3) \otimes I] + [(F_1(t)\sigma^3) \otimes I,\ I \otimes (F_2(t')\sigma^3)] +$$

$$+[I \otimes (F_2(t)\sigma^3),\ (F_1(t')\sigma^3) \otimes I] + [I \otimes (F_2(t)\sigma^3),\ I \otimes (F_2(t')\sigma^3)] = 0. \tag{3.41}$$

Alternativamente, poderia se ter usado o comutador (2.4),

$$\left[\Sigma_i^m, \Sigma_j^n\right] = 2i\delta_{mn}\varepsilon_{ijk}\Sigma_k^m,$$

para inferir que

$$\left[\hat{H}(t), \hat{H}(t')\right] = \left[F_1(t)\Sigma_z^1 + F_2(t)\Sigma_z^2,\ F_1(t')\Sigma_z^1 + F_2(t')\Sigma_z^2\right] = 0. \tag{3.42}$$

Como consequência, o operador evolução para esse problema é da forma (2.11)

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \hat{H}(\tau)d\tau\right],$$

o que acarreta

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0) &= \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\left[(\underbrace{F_1(\tau)\sigma_3) \otimes I}_{=\hat{H}_1} + \underbrace{I \otimes (F_2(\tau)\sigma_3)}_{=\hat{H}_2}\right]d\tau\right\} \\ &\overset{(4.4)}{=} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left[\int_{t_0}^{t} F_1(\tau)d\tau\right]\underbrace{\sigma_3 \otimes I}_{=\Sigma_z^1}\right\}\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left[\int_{t_0}^{t} F_2(\tau)d\tau\right]\underbrace{I \otimes \sigma_3}_{=\Sigma_z^2}\right\}, \end{aligned} \tag{3.43}$$

já que, por (2.4), $\hat{H}_1 = F_1(t)\Sigma_z^1$ e $\hat{H}_2 = F_2(t)\Sigma_z^2$ comutam e consequentemente

$$\left[\int_{t_0}^{t} \hat{H}_1(\tau)d\tau, \int_{t_0}^{t} \hat{H}_2(\tau)d\tau\right] = 0, \tag{3.44}$$

pois a dependência temporal em $\hat{H}_1$ e $\hat{H}_2$ se dá pelos fatores multiplicativos $F_1(t)$ e $F_2(t)$ respectivamente.

Além disso, pela relação de anti-comutação (2.4), que diz

$$\left[\Sigma_i^m, \Sigma_j^m\right]_+ = 2\delta_{ij},$$

tem-se que

$$\left(\Sigma_z^1\right)^2 = \left(\Sigma_z^2\right)^2 = \mathbf{I}, \tag{3.45}$$

ou, de modo alternativo,

$$\left(\sigma_3 \otimes I\right)^2 = \left(\sigma_3 \otimes I\right)\left(\sigma_3 \otimes I\right) \overset{(B.7)}{=} \left(\sigma_3\sigma_3 \otimes I\right) = I \otimes I = \mathbf{I}, \tag{3.46}$$

e analogamente,

$$\left(I \otimes \sigma_3\right)^2 = \mathbf{I}. \tag{3.47}$$

onde, nesta seção, $\mathbf{I}$ é a matriz identidade 4×4 (no Capítulo 4 o mesmo símbolo será usado para denotar a matriz identidade de ordem 8×8).

De posse da igualdade (3.45), ou alternativamente de (3.46) e (3.47), a solução da equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal, (2.9), relativo a este problema é, pela expressão (3.26),

$$\begin{aligned} \hat{U}(t,t_0) &= \left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{t_0}^{t} F_1(\tau)d\tau\right) - i\left(\sigma^3\otimes I\right)\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{t_0}^{t} F_1(\tau)d\tau\right)\right]\times \\ &\times\left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{t_0}^{t} F_2(\tau)d\tau\right) - i\left(I\otimes\sigma^3\right)\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{t_0}^{t} F_2(\tau)d\tau\right)\right]. \end{aligned} \tag{3.48}$$

Definindo

$$F_I(t) \equiv \int_{t_0}^{t} F_1(\tau)d\tau, \quad F_{II}(t) \equiv \int_{t_0}^{t} F_2(\tau)d\tau, \tag{3.49}$$

obtém-se finalmente

$$\hat{U}(t,t_0) = \left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{1}{\hbar}F_I(t)\right) - i\Sigma_z^1\sin\left(\frac{1}{\hbar}F_I(t)\right)\right]\left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{1}{\hbar}F_{II}(t)\right) - i\Sigma_z^2\sin\left(\frac{1}{\hbar}F_{II}(t)\right)\right]. \tag{3.50}$$

Obteve-se portanto, a solução para o caso de as duas partículas com spin 1/2 não interagentes estarem submetidas a campos magnéticos externos paralelos dependentes do tempo.

Casos ainda mais sofisticados da *Equação de Dois Spins* (2.26) são resolvidos em [3], [14] e [15].

Capítulo 4

Soluções Exatas para a Equação de Três Spins

Apesar de toda a computação quântica poder ser estudada através de sistemas de dois e quatro níveis de energia (ou ainda, para uma escolha adequada dos campos externos, apenas por sistemas de dois níveis), sistemas de 8 níveis são importantes para a implementação de algoritmos de correção de erros [4].

Neste capítulo são obtidos os exatos operadores de evolução temporal para sistemas de oito níveis para certas configurações de campos externos e de interação entre as partículas.

A última seção é dedica a resolução do problema de três spins interagentes pelo método conhecido como o *Ansatz de Bethe* [12].

4.1 Campo Magnético Constante e Interação de Troca Uniforme

Considera-se aqui um caso em que a Hamiltoniana não depende do tempo. Neste problema cada uma das três partículas de spin 1/2 está sujeita ao *mesmo* campo magnético $\mathbf{B} = (B^x, B^y, B^z)$ constante, ou seja, as componentes B^{x_i} independem do tempo. Além disso as funções de interação J_{ij} entre as partículas i e j são também independentes do tempo e todas iguais entre si.

Sendo assim o operador Hamiltoniano (lembrando que $\mathbf{F}$ é o produto do momento magnético de spin μ com o campo magnético externo $\mathbf{B}$ a menos de um sinal negativo, ou $\mathbf{F} = -\mu\mathbf{B}$) pode ser neste caso escrito como em (2.1) para $n = 3$:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{n} \mathbf{F}_i \mathbf{\Sigma}^i + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n-1} J_{i(i+1)}\Gamma^{i(i+1)} + \frac{1}{2}J_{1,n}\Gamma^{1n} =$$

$$\overset{(n=3)}{=} \left(\mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{\Sigma}^1 + \mathbf{F}_2 \cdot \mathbf{\Sigma}^2 + \mathbf{F}_3 \cdot \mathbf{\Sigma}^3\right) + \frac{1}{2}\left(J_{12}\Gamma^{12} + J_{23}\Gamma^{23} + J_{13}\Gamma^{13}\right). \tag{4.1}$$

A condição de que os três spins sentem o mesmo campo magnético é sintetizada na igualdade $\mathbf{F}_1 = \mathbf{F}_2 = \mathbf{F}_3 = \mathbf{F}$, do mesmo modo que para a interação de troca impôe-se $J_{12} = J_{23} = J_{13} = J$, com $\mathbf{F}$ e J estáticos no tempo. Assim, a matriz Hamiltoniana fica

$$\hat{H} = \underbrace{\mathbf{F}\cdot\left(\boldsymbol{\Sigma}^1 + \boldsymbol{\Sigma}^2 + \boldsymbol{\Sigma}^3\right)}_{=\hat{H}_{field}} + \underbrace{\frac{1}{2}J\left(\Gamma^{12} + \Gamma^{23} + \Gamma^{13}\right)}_{=\hat{H}_{int}}. \tag{4.2}$$

O termo da Hamiltoniana (4.2) relativo à interação das partículas com o *campo* magnético será aqui rotulado por $\hat{H}_{field}$ enquanto que o termo devido à *interação* intríseca entre elas será chamado $\hat{H}_{int}$.

O fato de o operador Hamiltoniano ser independente do tempo neste caso implica em que o operador de evolução temporal assuma a forma (2.10)

$$\hat{U}(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\,(t-t_0)\right] = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}_{field} + \hat{H}_{int}\right)(t-t_0)\right]. \tag{4.3}$$

Com o intuito de tornar o problema de se determinar a forma explícita de (4.3) talvez mais facilmente resolvível, o primeiro passo aqui é tentar escrever a exponencial de uma soma de matrizes em um produto de exponenciais matriciais. Isto é permitido desde que $\hat{H}_{field}$ e $\hat{H}_{int}$ comutem como diz a seguinte proposição.

Proposição 4.1 *Sejam M_1, $M_2 \in \mathrm{Mat}(\mathbb{C}, n)$ duas matrizes $n \times n$ com entradas complexas. Se M_1 e M_2 comutam, i.e. $[M_1, M_2] = 0$, então*

$$\exp(M_1 + M_2) = \exp(M_1)\exp(M_2) = \exp(M_2)\exp(M_1). \tag{4.4}$$

A demonstração desse resultado, muito útil no contexto da Mecânica Quântica, é feita no Apêndice A.

De fato é possível mostrar (vide Apêndice C) que $\hat{H}_{field}$ e $\hat{H}_{int}$ comutam[1], ou seja,

$$\left[\hat{H}_{field}, \hat{H}_{int}\right] = 0, \tag{4.5}$$

de modo que

$$\hat{U}(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}_{field} + \hat{H}_{int}\right)(t-t_0)\right] = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{field}\,(t-t_0)\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{int}\,(t-t_0)\right]. \tag{4.6}$$

O cálculo de cada uma das exponenciais à direita da igualdade acima é explicitado a seguir.

O primeiro termo é

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{field}\,(t-t_0)\right] = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{F}\cdot\left(\boldsymbol{\Sigma}^1 + \boldsymbol{\Sigma}^2 + \boldsymbol{\Sigma}^3\right)(t-t_0)\right]. \tag{4.7}$$

Da definição (2.2) é possível recuperar a forma menos sintetizada das matrizes $\boldsymbol{\Sigma}^k$, $k = 1,2,3$. No caso deste sistema de $n = 3$ partículas (sistema *tripartite*) elas assumem a forma

$$\boldsymbol{\Sigma}^1 = \boldsymbol{\sigma} \otimes I \otimes I,\ \boldsymbol{\Sigma}^2 = I \otimes \boldsymbol{\sigma} \otimes I,\ \boldsymbol{\Sigma}^3 = I \otimes I \otimes \boldsymbol{\sigma}, \tag{4.8}$$

ou, explicitando o caráter "multi-índice" de (4.8),

[1] O cálculo dessa relação de comutação é nada menos que essencial no método aqui utilizado para se determinar o operador de evolução. Ele é apresentado no Apêndice, a despeito de sua importância, apenas numa tentativa de não sobrecarregar a leitura e oferecer ao leitor opção de fazê-la a posteriori se assim preferir.

$$\Sigma_i^1 = \sigma_i \otimes I \otimes I,\ \Sigma_i^2 = I \otimes \sigma_i \otimes I,\ \Sigma_i^3 = I \otimes I \otimes \sigma_i,\ i = x, y, z. \tag{4.9}$$

Como consequência,

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{field}\,(t-t_0)\right] = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{F}\cdot(\boldsymbol{\sigma}\otimes I\otimes I + I\otimes\boldsymbol{\sigma}\otimes I + I\otimes I\otimes\boldsymbol{\sigma})\,(t-t_0)\right] =$$

$$= \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left[\underbrace{(\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma})\otimes I\otimes I}_{=\hat{H}_1} + \underbrace{I\otimes\ (\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma})\otimes I}_{=\hat{H}_2} + \underbrace{I\otimes I\otimes(\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma})}_{=\hat{H}_3}\right](t-t_0)\right\}. \tag{4.10}$$

As matrizes $\hat{H}_m$, $m = 1, 2, 3$, definidas acima comutam entre si, isto é, $\left[\hat{H}_m, \hat{H}_n\right] = 0$ com $m, n = 1, 2, 3$. Apesar da obviedade do último comutador, é interessante observar que sua nulidade pode ser alternativamente, ou mesmo elegantemente, inferida lembrando da relação de comutação (2.4)

$$\left[\Sigma_i^m, \Sigma_j^n\right] = 2i\delta_{mn}\varepsilon_{ijk}\Sigma_k^m$$

e notando que $\hat{H}_m = \mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\Sigma}^m,\ m = 1, 2, 3$.

No que segue

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{field}\,(t-t_0)\right] = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left[(\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma})\otimes I\otimes I\ \right](t-t_0)\right\}\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left[\ I\otimes\ (\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma})\otimes I\ \right](t-t_0)\right\}\times$$
$$\times\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left[\ I\otimes I\otimes(\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma})\right](t-t_0)\right\}. \tag{4.11}$$

Considere-se agora uma matriz $A \in \mathrm{Mat}(\mathbb{C}, m)$ e também matriz unidade I, de ordem $n\times n$. Da definição do produto de Kronecker (ou produto tensorial) decorre a particular propriedade que diz que (vide Apêndice B)

$$\begin{aligned}\exp(A\otimes I) &= (\exp A)\otimes I,\\ \exp(I\otimes A) &= I\otimes(\exp A)\,.\end{aligned} \tag{4.12}$$

Lançando mão de (4.12) tem-se que

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{field}\,(t-t_0)\right] = \left\{\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,(t-t_0)\right]\otimes I\otimes I\right\}\left\{I\otimes\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,(t-t_0)\right]\otimes I\right\}\times$$
$$\times\left\{I\otimes I\otimes\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,(t-t_0)\right]\right\}. \tag{4.13}$$

Da propriedade do *produto misto* (B.7), relativa a uma combinação entre o produto de Kronecker e o produto simples de matrizes, a expressão acima fica

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{field}\,(t-t_0)\right] = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,(t-t_0)\right]\otimes\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,(t-t_0)\right]\otimes\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,(t-t_0)\right]. \tag{4.14}$$

Afim de se conhecer a forma exata de $\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{field}\,(t-t_0)\right]$ basta, agora, realizar o cálculo de $\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,(t-t_0)\right]$. Para esse fim poderá recorrer-se à fórmula (3.26), pois, como é mostrado a seguir, $(\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2$ é proporcional ao operador identidade, $(\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2 = kI$:

$$
\begin{aligned}
(\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2 &= \left(F^x\sigma_1+F^y\sigma_2+F^z\sigma_3\right)\left(F^x\sigma_1+F^y\sigma_2+F^z\sigma_3\right)= \\
&= \left(F^x\right)^2\left(\sigma_1\right)^2+F^xF^y\sigma_1\sigma_2+F^xF^z\sigma_1\sigma_3+ \\
&\quad +F^xF^y\sigma_2\sigma_1+\left(F^y\right)^2\left(\sigma_2\right)^2+F^yF^z\sigma_2\sigma_3+ \\
&\quad +F^xF^z\sigma_3\sigma_1+F^yF^z\sigma_3\sigma_2+\left(F^z\right)^2\left(\sigma_3\right)^2 .
\end{aligned} \tag{4.15}
$$

Então, usando a regra de anti-comutação (3.28) satisfeita pelas *matrizes de Pauli*, a saber $[\sigma_i,\sigma_j]_+ = 2\delta_{ij}$, infere-se que

$$
\begin{aligned}
(\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2 &= \left[(F^x)^2+(F^y)^2+(F^z)^2\right]I+F^xF^y\underbrace{[\sigma_1,\sigma_2]_+}_{=0}+F^xF^z\underbrace{[\sigma_1,\sigma_3]_+}_{=0}+F^yF^z\underbrace{[\sigma_2,\sigma_3]_+}_{=0}= \\
&= (F^x)^2+(F^y)^2+(F^z)^2 .
\end{aligned} \tag{4.16}
$$

De fato, como mostrado acima, seja $|\mathbf{a}|$ a magnitude (ou módulo) de um vetor tri-dimensional de componentes reais qualquer, é resultado geral que, vide e.g. [17],

$$
(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{a})^2 = |\mathbf{a}|^2 , \tag{4.17}
$$

onde mais esta vez omitiu-se a matriz unidade 2×2 a direita da igualdade acima.

Reescrevendo agora a matriz $\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma}\left(t-t_0\right)\right]$ como sendo

$$
\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma}\left(t-t_0\right)\right]=\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\underbrace{\left[\frac{\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{\sqrt{(F^x)^2+(F^y)^2+(F^z)^2}}\right]}_{M}\sqrt{(F^x)^2+(F^y)^2+(F^z)^2}\left(t-t_0\right)\right\}, \tag{4.18}
$$

percebe-se que a matriz M definida acima goza da propriedade de que $M^2 = I$ e pela expressão (3.26), que diz que $\exp\left(iMx\right) \overset{\left(M^2=I\right)}{=} I\cos x + iM\sin x$, decorre a igualdade

$$
\begin{aligned}
\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma}\left(t-t_0\right)\right] &= I\cos\left(\frac{\sqrt{(F^x)^2+(F^y)^2+(F^z)^2}\left(t-t_0\right)}{\hbar}\right) \\
&\quad - iM\sin\left(\frac{\sqrt{(F^x)^2+(F^y)^2+(F^z)^2}\left(t-t_0\right)}{\hbar}\right).
\end{aligned} \tag{4.19}
$$

No segue a exponencial matricial $\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma}\left(t-t_0\right)\right]$ será rotulada como $\hat{u}_F$, ou seja $\hat{u}_F = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\sigma}\left(t-t_0\right)\right]$, de maneira que, por (4.14),

$$
\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{field}\left(t-t_0\right)\right] = \hat{u}_F\otimes\hat{u}_F\otimes\hat{u}_F. \tag{4.20}
$$

Afim de se obter o operador (4.6), $\hat{U}(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{field}\,(t-t_0)\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{int}\,(t-t_0)\right]$, o passo seguinte é calcular a exponencial $\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{int}\,(t-t_0)\right]$ relativa ao termo de interação entre as partículas. De (4.2),

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{int}\,(t-t_0)\right] = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{J}{2}\left(\Gamma^{12}+\Gamma^{23}+\Gamma^{13}\right)(t-t_0)\right]. \tag{4.21}$$

Os termos Γ^{ij} obedecem a definição (2.2), $\Gamma^{ij} = \mathbf{\Sigma}^i \cdot \mathbf{\Sigma}^j = \Sigma_x^i\Sigma_x^j + \Sigma_y^i\Sigma_y^j + \Sigma_z^i\Sigma_z^j$. Para o caso de $n = 3$ partículas obtém-se

$$\Gamma^{12} = \sum_{i=1}^{3}\sigma_i\otimes\sigma_i\otimes I,\quad \Gamma^{23} = \sum_{i=1}^{3} I\otimes\sigma_i\otimes\sigma_i,\quad \Gamma^{13} = \sum_{i=1}^{3}\sigma_i\otimes I\otimes\sigma_i. \tag{4.22}$$

Com algum esforço algébrico (usando diretamente (4.22) ou alternativamente (2.4)) é possível ver que

$$\left(\Gamma^{12}+\Gamma^{23}+\Gamma^{13}\right)^2 = 9\mathbf{I}, \tag{4.23}$$

onde $\mathbf{I}$ é a matrix identidade 8×8.

Agora a exponencial (4.21) é reescrita como sendo

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{int}\,(t-t_0)\right] = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\frac{3J}{2}\underbrace{\left[\frac{1}{3}\left(\Gamma^{12}+\Gamma^{23}+\Gamma^{13}\right)\right]}_{=M'}(t-t_0)\right\}. \tag{4.24}$$

Por (4.23) nota-se que a matrix M' definida acima como $M' = \frac{1}{3}\left(\Gamma^{12}+\Gamma^{23}+\Gamma^{13}\right)$ também satisfaz a condição $M'^2 = \mathbf{I}$ e consequentemente, pela igualdade (3.26),

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{int}\,(t-t_0)\right] = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{3J}{2}M'\,(t-t_0)\right] =$$
$$= \mathbf{I}\cos\left(\frac{3J}{2\hbar}(t-t_0)\right) - iM'\sin\left(\frac{3J}{2\hbar}(t-t_0)\right). \tag{4.25}$$

Ou

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{int}\,(t-t_0)\right] = \mathbf{I}\cos\left(\frac{3J}{2\hbar}(t-t_0)\right) - \frac{i}{3}\left(\Gamma^{12}+\Gamma^{23}+\Gamma^{13}\right)\sin\left(\frac{3J}{2\hbar}(t-t_0)\right). \tag{4.26}$$

Combinando (4.20) e (4.26), tem-se finalmente, para o operador evolução temporal (4.6) $\hat{U}(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{field}\,(t-t_0)\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{int}\,(t-t_0)\right]$, a forma explícita

$$\hat{U}(t,t_0) = \left(\hat{u}_F\otimes\hat{u}_F\otimes\hat{u}_F\right)\left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{3J}{2\hbar}(t-t_0)\right) - \frac{i}{3}\left(\Gamma^{12}+\Gamma^{23}+\Gamma^{13}\right)\sin\left(\frac{3J}{2\hbar}(t-t_0)\right)\right], \tag{4.27}$$

onde $\hat{u}_F$ foi obtido em (4.19).

4.2 Campo Magnético e Função de Interação Dependentes do Tempo

A presente seção é dedicada à resolução do caso em que cada um dos três spins 1/2 está sujeito ao mesmo campo magnético dependente do tempo, paralelo ao eixo z, e cujas as funções de interação entre as partículas são todas iguais e também dependentes da coordenada temporal.

As partículas estão imersas no campo externo $\mathbf{F}_1 = \mathbf{F}_2 = \mathbf{F}_3 = \mathbf{F} = \mathbf{n}F(t)$, com $\mathbf{n} = \mathbf{z} = (0,0,1)$, e as funções de interação satisfazem $J_{12} = J_{23} = J_{13} = J(t)$ de modo que o operador Hamiltoniano para este problema, na base canônica, fica

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{i=1}^{n=3} \mathbf{F}_i \mathbf{\Sigma}^i + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{2} J_{i(i+1)}\Gamma^{i(i+1)} + \frac{1}{2}J_{13}\Gamma^{13} \\ &= \left(\mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{\Sigma}^1 + \mathbf{F}_2 \cdot \mathbf{\Sigma}^2 + \mathbf{F}_3 \cdot \mathbf{\Sigma}^3\right) + \frac{1}{2}\left(J_{12}\Gamma^{12} + J_{23}\Gamma^{23} + J_{13}\Gamma^{13}\right) \\ &= F(t)\left(\Sigma_z^1 + \Sigma_z^2 + \Sigma_z^3\right) + \frac{1}{2}J(t)\left(\Gamma^{12} + \Gamma^{23} + \Gamma^{13}\right). \end{aligned} \tag{4.28}$$

Da definição (2.2) segue

$$\hat{H}(t) = \underbrace{F(t)(\sigma_3 \otimes I \otimes I \ + \ I \otimes \sigma_3 \otimes I \ + \ I \otimes I \otimes \sigma_3)}_{\hat{H}_{field}} \ + \ \underbrace{\frac{1}{2}J(t)\left(\Gamma^{12} + \Gamma^{23} + \Gamma^{13}\right)}_{\hat{H}_{int}}. \tag{4.29}$$

A Hamiltoniana acima é dependente do tempo, mas é mostrado no Apêndice D que os $H's$ em instantes de tempos diferentes comutam, ou seja $\left[\hat{H}(t), \hat{H}(t')\right] = 0$ para todo $t,\ t'$, de modo que o operador de evolução temporal é neste caso dado por (2.11),

$$\hat{U}(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \hat{H}(\tau)d\tau\right] = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\left[\hat{H}_{field}(\tau) + \hat{H}_{int}(\tau)\right]d\tau\right\}. \tag{4.30}$$

Não obstante, afim de se mostrar que

$$\left[\int_{t_0}^{t} \hat{H}_{field}(\tau)d\tau, \int_{t_0}^{t} \hat{H}_{int}(\tau)d\tau\right] = 0 \tag{4.31}$$

é suficiente saber que $\left[\hat{H}_{field}(t), \hat{H}_{int}(t)\right] = 0$ pois a dependência temporal nos termos $\hat{H}_{field}(t)$ e $\hat{H}_{int}(t)$ se dá por um fator multiplicativo como é visto em (4.29).

Sendo assim, tendo em mente a relação de comutação (2.5) $[\Gamma^{mn}, \mathbf{\Sigma}^m + \mathbf{\Sigma}^n] = 0$, não é difícil inferir que

$$\left[\hat{H}_{field}, \hat{H}_{int}\right] \overset{(4.29)}{=} \frac{1}{2}F(t)J(t)\left[\Sigma_z^1 + \Sigma_z^2 + \Sigma_z^3,\ \Gamma^{12} + \Gamma^{23} + \Gamma^{13}\right] = 0. \tag{4.32}$$

De fato o comutador acima está implicitamente calculado no Apêndice C. É o particular caso em que $F^x = F^y = 0$.

Consequentemente, a exponencial de uma soma de matrizes (4.30) pode ser escrita como o produto de exponenciais

$$\begin{aligned}
\hat{U}(t,t_0) &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}_{field}(\tau)d\tau\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}_{int}(\tau)d\tau\right] \\
&= \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\underbrace{\left[\int_{t_0}^{t}F(\tau)d\tau\right]}_{=F_I}(\sigma_3\otimes I\otimes I\ +\ I\otimes\sigma_3\otimes I\ +\ I\otimes I\otimes\sigma_3)\right\}\times \\
&\quad\times\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}\underbrace{\left[\int_{t_0}^{t}J(\tau)d\tau\right]}_{=J_I}\left(\Gamma^{12}+\Gamma^{23}+\Gamma^{13}\right)\right\}.
\end{aligned} \tag{4.33}$$

Na sequência, as integrais em F e J passarão a serem rotuladas como

$$F_I(t)\equiv\int_{t_0}^{t}F(\tau)d\tau,\quad J_I\,(t)\equiv\int_{t_0}^{t}J(\tau)d\tau. \tag{4.34}$$

O cálculo para a primeira exponencial em (4.33) é

$$\begin{aligned}
\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}_{field}(\tau)d\tau\right] &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar}F_I\left(\underbrace{\sigma_3\otimes I\otimes I}_{=\Sigma_z^1}\ +\ \underbrace{I\otimes\sigma_3\otimes I}_{=\Sigma_z^2}\ +\ \underbrace{I\otimes I\otimes\sigma_3}_{=\Sigma_z^3}\right)\right] \\
&\overset{(2.4+4.4)}{=}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}F_I\,(\sigma_3\otimes I\otimes I\ )\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}F_I\,(\ I\otimes\sigma_3\otimes I\ )\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}F_I\,(\ I\otimes I\otimes\sigma_3)\right].
\end{aligned} \tag{4.35}$$

De posse do fato de que

$$(\sigma_3\otimes I\otimes I\ )^2=(\ I\otimes\sigma_3\otimes I\ )^2=(\ I\otimes I\otimes\sigma_3)^2=I\otimes I\otimes I\equiv\mathbf{I}, \tag{4.36}$$

pode-se novamente usar a expressão (3.26)

$$\exp\left(iMx\right)\overset{\left(M^2=I\right)}{=}I\cos x+iM\sin x$$

para inferir que

$$\begin{aligned}
\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}_{field}(\tau)d\tau\right] &= \left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)-i\underbrace{(\sigma_3\otimes I\otimes I\ )}_{=\Sigma_z^1}\sin\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)\right]\times \\
&\times\left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)-i\underbrace{(I\otimes\sigma_3\otimes I\ )}_{=\Sigma_z^2}\sin\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)\right]\left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)-i\underbrace{(\ I\otimes I\otimes\sigma_3)}_{=\Sigma_z^3}\sin\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)\right],
\end{aligned} \tag{4.37}$$

ou

$$\begin{aligned}
\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}_{field}(\tau)d\tau\right] &= \left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)-i\left(\Sigma_z^1\right)\sin\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)\right]\times \\
&\quad \left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)-i\left(\Sigma_z^2\right)\sin\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)\right]\left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)-i\left(\Sigma_z^3\right)\sin\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)\right] \\
&= \prod_{k=1}^{3}\left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)-i\left(\Sigma_z^k\right)\sin\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)\right]. \qquad (4.38)
\end{aligned}$$

O próximo e derradeiro passo na resolução desse problema é computar a exponencial

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}_{int}(\tau)d\tau\right]=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}\underbrace{\left(\int_{t_0}^{t}J(\tau)d\tau\right)}_{=J_I(t)}\left(\Gamma^{12}+\Gamma^{23}+\Gamma^{13}\right)\right],$$

que, por (4.26), é

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}_{int}(\tau)d\tau\right]=\mathbf{I}\cos\left(\frac{3}{2\hbar}J_I\right)-\frac{i}{3}\left(\Gamma^{12}+\Gamma^{23}+\Gamma^{13}\right)\sin\left(\frac{3}{2\hbar}J_I\right). \qquad (4.39)$$

Portanto, pelas expressões (4.38) e (4.39) tem-se a forma exata do operador evolução temporal para este problema de três corpos,

$$\begin{aligned}
\hat{U}(t,t_0) &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}_{field}(\tau)d\tau\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}_{int}(\tau)d\tau\right] \\
&= \left\{\prod_{k=1}^{3}\left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)-i\left(\Sigma_z^k\right)\sin\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)\right]\right\}\times \\
&\quad\times\left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{3}{2\hbar}J_I\right)-\frac{i}{3}\left(\Gamma^{12}+\Gamma^{23}+\Gamma^{13}\right)\sin\left(\frac{3}{2\hbar}J_I\right)\right]. \qquad (4.40)
\end{aligned}$$

Este resultado será útil na resolução do análogo do problema de Rabi para três spins discutido na seção 4.4 .

4.3 Campos Externos Paralelos Não-Estáticos Diferentes em Cada Spin e Interação Nula entre as Partículas

Aqui é apresentado o particular caso em que os três spins 1/2, não interagentes aqui ($J_{ij}=0$), estão sujeitos a diferentes campos externos dependentes do tempo com a mesma direção fixada

$$\mathbf{F}_1=\mathbf{n}F_1(t),\quad \mathbf{F}_2=\mathbf{n}F_2(t),\quad \mathbf{F}_3=\mathbf{n}F_3(t), \qquad (4.41)$$

onde $\mathbf{n}$ é um vetor unitário constante. Sem perda de generalidade, é possível escolher um sistema do coordenadas conveniente, ou usando uma rotação constante, que devido à (2.6) não altera o problema mesmo no caso mais geral de $J_{ij} \neq 0$ (os termos de interação entre as partículas são invariantes sob as operações de rotação 2.7). Faz-se aqui, então, $\mathbf{n} = \mathbf{z} = (0, 0, 1)$ de modo que

$$\mathbf{F}_1 = (0, 0, F_1(t)) \,, \; \mathbf{F}_2 = (0, 0, F_2(t)) \,, \; \mathbf{F}_3 = (0, 0, F_3(t)) \,. \tag{4.42}$$

Poderia-se assim descrever um sistema em que as partículas estão suficientemente separadas para que a interação entre elas seja desprezível. Neste caso o operador Hamiltoniano, aqui mais uma vez na base canônica, pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{i=1}^{n} \mathbf{F}_i \mathbf{\Sigma}^i \overset{(n=3)}{=} \mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{\Sigma}^1 + \mathbf{F}_2 \cdot \mathbf{\Sigma}^2 + \mathbf{F}_3 \cdot \mathbf{\Sigma}^3 = \\ &= F_1(t) \Sigma_z^1 + F_2(t) \Sigma_z^2 + F_3(t) \Sigma_z^3, \end{aligned} \tag{4.43}$$

onde, por (2.22)

$$\Sigma_z^1 = \sigma_3 \otimes I \otimes I, \;\; \Sigma_z^2 = I \otimes \sigma_3 \otimes I, \, \Sigma_z^3 = I \otimes I \otimes \sigma_3, \tag{4.44}$$

de maneira que

$$\hat{H} = F_1(t) \left(\sigma_3 \otimes I \otimes I \right) + F_2(t) \left(I \otimes \sigma_3 \otimes I \right) \; + \; F_3(t) \left(I \otimes I \otimes \sigma_3 \right) . \tag{4.45}$$

O operador Hamiltoniano (4.45) goza da propriedade de comutar consigo mesmo em instantes de tempos diferentes, ou seja

$$\left[\hat{H}(t), \hat{H}(t') \right] = 0 \;\; \forall \;\; t, t', \tag{4.46}$$

pois de fato

$$\begin{gathered} \left[\hat{H}(t), \; \hat{H}(t') \right] = \\ \underbrace{\left[F_1(t) \;\; (\sigma_3 \otimes I \otimes I) \,, \;\; F_1(t') \;\; (\sigma_3 \otimes I \otimes I) \right]}_{=0} + \\ + \underbrace{\left[F_2(t) \left(\; I \otimes \sigma_3 \otimes I \right) , \;\; F_2(t') \left(\; I \otimes \sigma_3 \otimes I \right) \right]}_{=0} + \\ + \underbrace{\left[\; F_3(t) \left(I \otimes I \otimes \sigma_3 \right) , \;\; F_3(t') \left(I \otimes I \otimes \sigma_3 \right) \right]}_{=0} = 0, \end{gathered} \tag{4.47}$$

onde omitiu-se neste cálculo os termos obviamente nulos.

Poderia se ter usado, como alternativa, o comutador (2.4),

$$\left[\Sigma_i^m, \Sigma_j^n \right] = 2i \delta_{mn} \varepsilon_{ijk} \Sigma_k^m,$$

para concluir que

$$\left[\hat{H}(t), \hat{H}(t') \right] \overset{(4.43)}{=} \left[F_1(t) \Sigma_z^1 + F_2(t) \Sigma_z^2 + F_3(t) \Sigma_z^3, \;\; F_1(t') \Sigma_z^1 + F_2(t') \Sigma_z^2 + F_3(t') \Sigma_z^3 \right] = 0. \tag{4.48}$$

O operador de evolução temporal para esse problema é, consequentemente, da forma (2.11)

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \hat{H}(\tau) d\tau \right],$$

o que implica

$$\begin{aligned}\hat{U}(t,t_0) &= \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\left[\underbrace{F_1(\tau)\,(\sigma_3\otimes I\otimes I)}_{=\hat{H}_1}+\underbrace{F_2(\tau)\,(I\otimes\sigma_3\otimes I)}_{=\hat{H}_2}\;+\;\underbrace{F_3(\tau)\,(I\otimes I\otimes\sigma_3)}_{=\hat{H}_3}\right]d\tau\right\}\\ &\overset{(4.4)}{=} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}_1(\tau)d\tau\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}_2(\tau)d\tau\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{H}_3(\tau)d\tau\right],\end{aligned} \tag{4.49}$$

devido a nulidade dos comutadores

$$\left[\int_{t_0}^{t}\hat{H}_i(\tau)d\tau,\quad\int_{t_0}^{t}\hat{H}_j(\tau)d\tau\right]=0,\qquad i,j=1,2,3. \tag{4.50}$$

Portanto,

$$\hat{U}(t,t_0)=\exp\left[-\frac{iF_I}{\hbar}\underbrace{(\sigma_3\otimes I\otimes I)}_{=\Sigma_z^1}\right]\exp\left[-\frac{iF_{II}}{\hbar}\underbrace{(I\otimes\sigma_3\otimes I)}_{=\Sigma_z^2}\right]\exp\left[-\frac{iF_{III}}{\hbar}\underbrace{(I\otimes I\otimes\sigma_3)}_{=\Sigma_z^3}\right], \tag{4.51}$$

onde definiu-se

$$F_I=\int_{t_0}^{t}F_1(\tau)d\tau,\quad F_{II}=\int_{t_0}^{t}F_2(\tau)d\tau,\quad F_{III}=\int_{t_0}^{t}F_3(\tau)d\tau. \tag{4.52}$$

Outrossim, o anti-comutador (2.4)

$$\left[\Sigma_i^m,\Sigma_j^m\right]_+=2\delta_{ij},$$

implica na igualdade

$$\left(\Sigma_z^i\right)^2=\mathbf{I},\;\; i=1,2,3, \tag{4.53}$$

onde $\mathbf{I}$ é a matriz identidade 8×8 neste Capítulo.

De (4.53) segue que a solução da equação de Schrödinger para o operador de evolução temporal, (2.9), neste caso é, pela igualdade (3.26),

$$\hat{U}=\left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)-i\Sigma_z^1\sin\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)\right]\left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{F_{II}}{\hbar}\right)-i\Sigma_z^2\sin\left(\frac{F_{II}}{\hbar}\right)\right]\left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{F_{III}}{\hbar}\right)-i\Sigma_z^3\sin\left(\frac{F_{III}}{\hbar}\right)\right]. \tag{4.54}$$

Não obstante, a solução acima poderia equivalentemente ser reescrita de outra forma, pois de (4.51),

$$\begin{aligned}\hat{U}(t,t_0) &= \left[\exp\left(-\frac{iF_I}{\hbar}\sigma_3\right)\otimes I\otimes I\right]\left[I\otimes\exp\left(-\frac{iF_{II}}{\hbar}\sigma_3\right)\otimes I\right]\left[I\otimes I\otimes\exp\left(-\frac{iF_{III}}{\hbar}\sigma_3\right)\right]\\ &\overset{(B.12+B.11)}{=} \exp\left(-\frac{iF_I}{\hbar}\sigma_3\right)\otimes\exp\left(-\frac{iF_{II}}{\hbar}\sigma_3\right)\otimes\exp\left(-\frac{iF_{III}}{\hbar}\sigma_3\right),\end{aligned} \tag{4.55}$$

e pela fórmula (3.26),

$$\hat{U}=\left[I\cos\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)-i\sigma_3\sin\left(\frac{F_I}{\hbar}\right)\right]\otimes\left[I\cos\left(\frac{F_{II}}{\hbar}\right)-i\sigma_3\sin\left(\frac{F_{II}}{\hbar}\right)\right]\otimes\left[I\cos\left(\frac{F_{III}}{\hbar}\right)-i\sigma_3\sin\left(\frac{F_{III}}{\hbar}\right)\right] \tag{4.56}$$

onde I é a matriz identidade 2×2. As soluções (4.54) e (4.56) são, portanto equivalentes.

Foi obtida então a solução para o caso dos três spins 1/2 colineares e não interagentes estarem sujeitos a campos magnéticos externos paralelos dependentes do tempo.

De fato, este problema pode ser generalizado para o caso de N partículas, ou seja, o caso em que a i-ésima partícula sente o campo externo

$$\mathbf{F}_i = (0, 0, F_i(t))\,, \; i = 1, 2, \ldots, N. \tag{4.57}$$

Neste caso o operador Hamiltoniano pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{i=1}^{N} \mathbf{F}_i \mathbf{\Sigma}^i = \mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{\Sigma}^1 + \mathbf{F}_2 \cdot \mathbf{\Sigma}^2 + \ldots + \mathbf{F}_N \cdot \mathbf{\Sigma}^N \\ &= F_1(t)\Sigma_z^1 + F_2(t)\Sigma_z^2 + \ldots + F_N(t)\Sigma_z^N. \end{aligned} \tag{4.58}$$

Seguindo os mesmos passos da obtenção de (4.54), chega-se à expressão

$$\hat{U}(t, t_0) = \prod_{k=1}^{N} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left[\int_{t_0}^{t} F_k(\tau)d\tau\right]\Sigma_z^k\right\} \tag{4.59}$$

e, portanto, à solução exata

$$\hat{U} = \prod_{k=1}^{N}\left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{\tilde{F}_k}{\hbar}\right) - i\Sigma_z^k \sin\left(\frac{\tilde{F}_k}{\hbar}\right)\right], \tag{4.60}$$

onde neste caso $\mathbf{I}$ e Σ_z^k tem dimensão $2^N \times 2^N$ e

$$\tilde{F}_k = \int_{t_0}^{t} F_k(\tau)d\tau, \qquad k = 1, 2, \ldots, N. \tag{4.61}$$

4.4 Análogo do Problema de Rabi para o Sistema de Três Spins

No Capítulo 3 foi apresentada a solução para o chamado *Problema de Rabi*. Neste problema de um corpo, a partícula de spin $s = 1/2$ está imersa em um campo externo oscilante da forma $\mathbf{F} = (A\cos\omega t,\ A\sin\omega t,\ A_0)$, aqui denominado *Campo de Rabi*, onde A, A_0 e ω são constantes reais, e cuja dinâmica é governada pela *Equação de Spin* (2.15) $i\hbar\dot{\psi} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F})\,\psi$, $\quad \psi = \begin{pmatrix} \eta_1(t) \\ \eta_2(t) \end{pmatrix}$. A seção atual é encarregada de apresentar a solução para a *Equação de Três Spins* (2.34) relativa ao análogo do problema de Rabi para o sistema de três spins. Neste caso, as partículas estão sujeitas ao mesmo Campo de Rabi e ainda interagem entre si via funções de interação de Heisenberg dependentes do tempo e iguais entre si, isto é,

$$\mathbf{F}_1 = \mathbf{F}_2 = \mathbf{F}_3 = \mathbf{F} = (A\cos\omega t,\ A\sin\omega t,\ A_0)\,, \quad J_{12} = J_{23} = J_{13} = J\,(t)\,. \tag{4.62}$$

Esse sistema de $n = 3$ corpos é, então, regido pela equação

$$i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi, \tag{4.63}$$

onde Ψ é o tri-spinor de oito componentes $\Psi = \begin{pmatrix} \eta_1(t) \\ \vdots \\ \eta_8(t) \end{pmatrix}$ e a matriz Hamiltoniana é dada por

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{i=1}^{n} \mathbf{F}_i \mathbf{\Sigma}^i + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n-1} J_{i(i+1)}\Gamma^{i(i+1)} + \frac{1}{2}J_{1,n}\Gamma^{1n} \\ &= \left(\mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{\Sigma}^1 + \mathbf{F}_2 \cdot \mathbf{\Sigma}^2 + \mathbf{F}_3 \cdot \mathbf{\Sigma}^3\right) + \frac{1}{2}\left(J_{12}\Gamma^{12} + J_{23}\Gamma^{23} + J_{13}\Gamma^{13}\right) \\ &= \mathbf{F}\cdot \left(\mathbf{\Sigma}^1 + \mathbf{\Sigma}^2 + \mathbf{\Sigma}^3\right) + \frac{1}{2}J\left(\Gamma^{12} + \Gamma^{23} + \Gamma^{13}\right). \end{aligned} \tag{4.64}$$

No que segue, rotações $\mathcal{R}_{\mathbf{n}}$ em uma direção $\hat{\mathbf{n}}$ qualquer comutam com os termos de interação Γ^{kl} (entre as partículas) na Hamiltoniana (4.64). Isto é, pelas equações (2.6) e (2.7),

$$\left[\Gamma^{kl}, \mathcal{R}_{\mathbf{n}}\right] = 0,$$

onde

$$\mathcal{R}_{\mathbf{n}}(\theta) = \exp\left(-\frac{i\theta}{2}\hat{\mathbf{n}}\cdot \sum_{i=1}^{n} \mathbf{\Sigma}^i\right) = \prod_{k=1}^{n} \exp\left(-\frac{i\theta}{2}\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Sigma}^k\right).$$

Devido a essa invariância rotacional, é possível utilizar o método do *sistema de coordenadas girantes* [11] que gira com o campo externo $\mathbf{F}$ em (4.62), de maneira análoga ao que é feito no problema de Rabi ordinário, discutido no capítulo 3.

Com essa finalidade, o estado de spin Ψ será convenientemente reescrito como uma rotação $\mathcal{R}_z(\omega t)$ aplicada no estado de spin Ψ' (que satisfaz uma nova equação de Schrödinger como será visto, relativa ao novo referencial), ou seja

$$\Psi(t) = \mathcal{R}_z(\omega t)\Psi'(t). \tag{4.65}$$

Pela expressão (2.7),

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_z(\omega t) &= \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\sum_{i=1}^{n=3} \Sigma_z^i\right) \overset{(2.2)}{=} \exp\left\{\frac{-i\omega t}{2}\left[(\sigma_z \otimes I \otimes I) + (I \otimes \sigma_z \otimes I) + (I \otimes I \otimes \sigma_z)\right]\right\} \\ &= \exp\left[\frac{-i\omega t}{2}(\sigma_z \otimes I \otimes I)\right] \exp\left[\frac{-i\omega t}{2}(I \otimes \sigma_z \otimes I)\right] \exp\left[\frac{-i\omega t}{2}(I \otimes I \otimes \sigma_z)\right]. \end{aligned} \tag{4.66}$$

De (B.11) e (B.12) tem-se que

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_z(\omega t) &= \left[\exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\sigma_z\right) \otimes I \otimes I\right] \left[I \otimes \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\sigma_z\right) \otimes I\right] \left[I \otimes I \otimes \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\sigma_z\right)\right] = \\ &= \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\sigma_z\right) \otimes \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\sigma_z\right) \otimes \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\sigma_z\right). \end{aligned} \tag{4.67}$$

Definindo

$$\hat{r}_z \equiv \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\sigma_z\right), \tag{4.68}$$

surge

$$\mathcal{R}_z(\omega t) = \hat{r}_z \otimes \hat{r}_z \otimes \hat{r}_z. \tag{4.69}$$

Substituindo $\Psi(t) = \mathcal{R}_z(\omega t)\Psi'(t)$ na equação de três spins $i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi$, analogamente à obtenção de (3.17) tem-se aqui também uma nova equação de três spins

$$\hat{H}'\Psi' = i\hbar\dot{\Psi}', \tag{4.70}$$

onde o operador Hamiltoniano $\hat{H}'$ no espaço transformado é

$$\hat{H}' = \mathcal{R}_z^{-1}\hat{H}\mathcal{R}_z - i\hbar\mathcal{R}_z^{-1}\dot{\mathcal{R}}_z. \tag{4.71}$$

Consequentemente,

$$\hat{H}' = \mathcal{R}_z^{-1}\left[\underbrace{\mathbf{F}\cdot\left(\mathbf{\Sigma}^1 + \mathbf{\Sigma}^2 + \mathbf{\Sigma}^3\right)}_{=\hat{H}_{field}} + \underbrace{\frac{1}{2}J\left(\Gamma^{12} + \Gamma^{23} + \Gamma^{13}\right)}_{=\hat{H}_{int}}\right]\mathcal{R}_z - i\hbar\mathcal{R}_z^{-1}\dot{\mathcal{R}}_z. \tag{4.72}$$

Rotulando os termos na Hamiltoniana (4.64) como

$$\hat{H}_{field} \equiv \mathbf{F}\cdot\left(\mathbf{\Sigma}^1 + \mathbf{\Sigma}^2 + \mathbf{\Sigma}^3\right), \quad \hat{H}_{int} \equiv \frac{1}{2}J\left(\Gamma^{12} + \Gamma^{23} + \Gamma^{13}\right), \tag{4.73}$$

segue que $\hat{H} = \hat{H}_{field} + \hat{H}_{int}$, de modo que

$$\hat{H}' = \mathcal{R}_z^{-1}\hat{H}_{field}\mathcal{R}_z + \mathcal{R}_z^{-1}\hat{H}_{int}\mathcal{R}_z - i\hbar\mathcal{R}_z^{-1}\dot{\mathcal{R}}_z. \tag{4.74}$$

Mas, por (2.6), o termo de interação de troca entre as partículas $\hat{H}_{int}$ comuta com a operação $\mathcal{R}_z$ e, assim, o segundo termo no lado direito de (4.74) fica

$$\mathcal{R}_z^{-1}\hat{H}_{int}\mathcal{R}_z = \mathcal{R}_z^{-1}\mathcal{R}_z\hat{H}_{int} = \hat{H}_{int}, \tag{4.75}$$

o que acarreta

$$\hat{H}' = \mathcal{R}_z^{-1}\hat{H}_{field}\mathcal{R}_z - i\hbar\mathcal{R}_z^{-1}\dot{\mathcal{R}}_z + \hat{H}_{int}. \tag{4.76}$$

A tarefa agora é calcular $\mathcal{R}_z^{-1}\hat{H}_{field}\mathcal{R}_z - i\hbar\mathcal{R}_z^{-1}\dot{\mathcal{R}}_z$. Para o primeiro destes termos, tem-se que

$$\mathcal{R}_z^{-1}\hat{H}_{field}\mathcal{R}_z \overset{(4.69)}{=} \left(\hat{r}_z \otimes \hat{r}_z \otimes \hat{r}_z\right)^{-1}\left[\mathbf{F}\cdot\left(\mathbf{\Sigma}^1 + \mathbf{\Sigma}^2 + \mathbf{\Sigma}^3\right)\right]\left(\hat{r}_z \otimes \hat{r}_z \otimes \hat{r}_z\right). \tag{4.77}$$

Uma propriedade inerente ao produto de Kronecker é o fato de que se as matrizes A e B são inversíveis, então

$$(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1}. \tag{4.78}$$

Mais que isso, o produto $A \otimes B$ é inversível se e somente se A e B são inversíveis.

Como a rotação (4.68) $\hat{r}_z = \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\sigma_z\right)$ é inversível a expressão (4.77) passa a ser

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_z^{-1}\hat{H}_{field}\mathcal{R}_z &\overset{(4.78+2.2)}{=} \left(\hat{r}_z^{-1} \otimes \hat{r}_z^{-1} \otimes \hat{r}_z^{-1}\right) \times \\
&\times \left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F}) \otimes I \otimes I \;+\; I \otimes (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F}) \otimes I \;+\; I \otimes I \otimes (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F})\right]\left(\hat{r}_z \otimes \hat{r}_z \otimes \hat{r}_z\right) \\
&\overset{(B.7)}{=} \left[\hat{r}_z^{-1}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F})\hat{r}_z \otimes I \otimes I\right] + \left[I \otimes \hat{r}_z^{-1}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F})\hat{r}_z \otimes I\right] + \left[I \otimes I \otimes \hat{r}_z^{-1}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F})\hat{r}_z\right].
\end{aligned} \tag{4.79}$$

Como já fora calculado no problema de Rabi para uma partícula,

$$\hat{r}_z^{-1}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F})\hat{r}_z = A\sigma_1 + A_0\sigma_3, \tag{4.80}$$

ou seja,

$$\mathcal{R}_z^{-1}\hat{H}_{field}\mathcal{R}_z = (A\sigma_1 + A_0\sigma_3)\otimes I\otimes I \ + \ I\otimes(A\sigma_1 + A_0\sigma_3)\otimes I \ + \ I\otimes I\otimes(A\sigma_1 + A_0\sigma_3). \quad (4.81)$$

Afim de se calcular $\mathcal{R}_z^{-1}\hat{H}_{field}\mathcal{R}_z - i\hbar\mathcal{R}_z^{-1}\dot{\mathcal{R}}_z$ resta agora obter-se o termo $\mathcal{R}_z^{-1}\dot{\mathcal{R}}_z$:

$$\mathcal{R}_z^{-1}\dot{\mathcal{R}}_z = \left(\hat{r}_z^{-1}\otimes\hat{r}_z^{-1}\otimes\hat{r}_z^{-1}\right)\frac{d}{dt}\left(\hat{r}_z\otimes\hat{r}_z\otimes\hat{r}_z\right). \quad (4.82)$$

Vale a regra de Leibniz para o produto de Kronecker. Então,

$$\frac{d}{dt}\left(\hat{r}_z\otimes\hat{r}_z\otimes\hat{r}_z\right) = \left[\left(\frac{d}{dt}\hat{r}_z\right)\otimes\hat{r}_z\otimes\hat{r}_z\right] + \left[\hat{r}_z\otimes\left(\frac{d}{dt}\hat{r}_z\right)\otimes\hat{r}_z\right] + \left[\hat{r}_z\otimes\hat{r}_z\otimes\left(\frac{d}{dt}\hat{r}_z\right)\right], \quad (4.83)$$

ou seja,

$$\mathcal{R}_z^{-1}\dot{\mathcal{R}}_z = \left[\left(\hat{r}_z^{-1}\frac{d}{dt}\hat{r}_z\right)\otimes I\otimes I\right] + \left[I\otimes\left(\hat{r}_z^{-1}\frac{d}{dt}\hat{r}_z\right)\otimes I\right] + \left[I\otimes I\otimes\left(\hat{r}_z^{-1}\frac{d}{dt}\hat{r}_z\right)\right]. \quad (4.84)$$

Lembrando que pela equação (3.22)

$$\hat{r}_z^{-1}\frac{d}{dt}\hat{r}_z = \frac{-i\omega\sigma_3}{2},$$

ocorre que

$$\mathcal{R}_z^{-1}\dot{\mathcal{R}}_z = \frac{-i\omega}{2}\left[(\sigma_3\otimes I\otimes I) + (I\otimes\sigma_3\otimes I) + (I\otimes I\otimes\sigma_3)\right] = \frac{-i\omega}{2}\left(\Sigma_z^1 + \Sigma_z^2 + \Sigma_z^3\right), \quad (4.85)$$

e, então, por (4.81) e (4.85) chega-se à

$$\begin{aligned}\mathcal{R}_z^{-1}\hat{H}_{field}\mathcal{R}_z - i\hbar\mathcal{R}_z^{-1}\dot{\mathcal{R}}_z \ &= \ (A\sigma_1 + A_0\sigma_3)\otimes I\otimes I \ + \ I\otimes(A\sigma_1 + A_0\sigma_3)\otimes I \ + \ I\otimes I\otimes(A\sigma_1 + A_0\sigma_3) \\ &\quad -\frac{\hbar\omega}{2}\left[(\sigma_3\otimes I\otimes I) + (I\otimes\sigma_3\otimes I) + (I\otimes I\otimes\sigma_3)\right], \qquad (4.86)\end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned}\mathcal{R}_z^{-1}\hat{H}_{field}\mathcal{R}_z - i\hbar\mathcal{R}_z^{-1}\dot{\mathcal{R}}_z \ &= \ A\left[(\sigma_1\otimes I\otimes I) + (I\otimes\sigma_1\otimes I) + (I\otimes I\otimes\sigma_1)\right] + \\ &\quad + \left(A_0 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)\left[(\sigma_3\otimes I\otimes I) + (I\otimes\sigma_3\otimes I) + (I\otimes I\otimes\sigma_3)\right] \\ &\overset{(2.2)}{=} A\left(\Sigma_x^1 + \Sigma_x^2 + \Sigma_x^3\right) + \left(A_0 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)\left(\Sigma_z^1 + \Sigma_z^2 + \Sigma_z^3\right). \qquad (4.87)\end{aligned}$$

Para fins de comparação, o operador Hamiltoniano original (4.64) tem a forma

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{n=3}\mathbf{F}_i\mathbf{\Sigma}^i + \frac{1}{2}J(t)\left(\Gamma^{12} + \Gamma^{23} + \Gamma^{13}\right) \ , \quad \mathbf{F}_i = \left(A\cos\omega t, \ A\sin\omega t, \ A_0\right) \ , \quad i = 1,2,3 \qquad (4.88)$$

enquanto que a nova Hamiltoniana $\hat{H}'$ (4.76), no sistema rodado, passa a ser

$$\hat{H}' = \underbrace{\sum_{i=1}^{n=3}\mathbf{F}'_i\mathbf{\Sigma}^i}_{\hat{H}'_{field}} + \underbrace{\frac{1}{2}J(t)\left(\Gamma^{12} + \Gamma^{23} + \Gamma^{13}\right)}_{\hat{H}'_{int}} , \quad \mathbf{F}'_i = \left(A, \ 0, \ A'_0\right) \ , \quad A'_0 = A_0 - \frac{\hbar\omega}{2} \ , \quad i = 1,2,3. \ (4.89)$$

Agora é possível alinhar o campo externo constante $\mathbf{F}' = \mathbf{F}'_1 = \mathbf{F}'_2 = \mathbf{F}'_3$ acima com a direção $\mathbf{z}$ considerando uma segunda rotação, desta vez em torno do eixo $\mathbf{y}$, de um ângulo θ tal que $\tan\theta = A/A'_0$. Com esta finalidade, reescreve-se o estado de spin Ψ' (que satisfaz (4.70)) como

$$\Psi'(t) = \mathcal{R}_y(\theta)\Psi''(t), \tag{4.90}$$

com $\mathcal{R}_y(\theta)$ dada por

$$\mathcal{R}_y(\theta) = \exp\left(-\frac{i}{2}\theta\sum_{i=1}^{3}\Sigma_y^i\right) = \prod_{k=1}^{n=3}\exp\left(-\frac{i\theta}{2}\Sigma_y^k\right), \quad \tan\theta = \frac{A}{A'_0}. \tag{4.91}$$

Substituindo o spinor rodado (4.90) na equação de Schrödinger (4.70) conclui-se

$$\hat{H}'\mathcal{R}_y(\theta)\Psi''(t) = i\hbar\left[\underbrace{\dot{\mathcal{R}}_y(\theta)}_{=0}\Psi''(t) + \mathcal{R}_y(\theta)\dot{\Psi}''(t)\right] = i\hbar\mathcal{R}_y(\theta)\dot{\Psi}''(t), \tag{4.92}$$

pois a operação de rotação $\mathcal{R}_y(\theta)$ independe do tempo. Agora, multiplicando à esquerda a igualdade acima pela inversa de $\mathcal{R}_y(\theta)$ obtém-se

$$\underbrace{\mathcal{R}_y^{-1}(\theta)\hat{H}'\mathcal{R}_y(\theta)}_{=\hat{H}''}\Psi''(t) = i\hbar\dot{\Psi}''(t), \tag{4.93}$$

ou seja, uma nova equação de três spins

$$\hat{H}''\Psi'' = i\hbar\dot{\Psi}'', \quad \hat{H}'' = \mathcal{R}_y^{-1}\hat{H}'\mathcal{R}_y. \tag{4.94}$$

Nesse novo sistema tem-se

$$\begin{aligned}\hat{H}'' = \mathcal{R}_y^{-1}\hat{H}'\mathcal{R}_y &\overset{(4.89)}{=} \mathcal{R}_y^{-1}\left(\hat{H}'_{field} + \hat{H}'_{int}\right)\mathcal{R}_y = \mathcal{R}_y^{-1}\hat{H}'_{field}\mathcal{R}_y + \mathcal{R}_y^{-1}\hat{H}'_{int}\mathcal{R}_y \\ &\overset{(2.6)}{=} \mathcal{R}_y^{-1}\hat{H}'_{field}\mathcal{R}_y + \mathcal{R}_y^{-1}\mathcal{R}_y\hat{H}'_{int} = \mathcal{R}_y^{-1}\hat{H}'_{field}\mathcal{R}_y + \underbrace{\hat{H}'_{int}}_{=\hat{H}_{int}},\end{aligned} \tag{4.95}$$

e, de (4.91),

$$\begin{aligned}\mathcal{R}_y(\theta) &= \exp\left(-\frac{i\theta}{2}\sigma_2\otimes I\otimes I\right)\exp\left(-\frac{i\theta}{2}I\otimes\sigma_2\otimes I\right)\exp\left(-\frac{i\theta}{2}I\otimes I\otimes\sigma_2\right) \\ &= \exp\left(\frac{-i\theta}{2}\sigma_2\right)\otimes\exp\left(\frac{-i\theta}{2}\sigma_2\right)\otimes\exp\left(\frac{-i\theta}{2}\sigma_2\right) = \hat{r}_y\otimes\hat{r}_y\otimes\hat{r}_y,\end{aligned} \tag{4.96}$$

onde definiu-se

$$\hat{r}_y \equiv \exp\left(\frac{-i\theta}{2}\sigma_2\right). \tag{4.97}$$

Dessa forma, afim de se calcular o operador Hamiltoniano $\hat{H}''$, segue que

$$\begin{aligned}\mathcal{R}_y^{-1}\hat{H}'_{field}\mathcal{R}_y &= (\hat{r}_y\otimes\hat{r}_y\otimes\hat{r}_y)^{-1}\left[\mathbf{F}'\cdot\left(\mathbf{\Sigma}^1 + \mathbf{\Sigma}^2 + \mathbf{\Sigma}^3\right)\right](\hat{r}_y\otimes\hat{r}_y\otimes\hat{r}_y) = \\ &= \left(\hat{r}_y^{-1}\otimes\hat{r}_y^{-1}\otimes\hat{r}_y^{-1}\right)\left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F}')\otimes I\otimes I \;+\; I\otimes(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F}')\otimes I \;+\; I\otimes I\otimes(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F}')\right](\hat{r}_y\otimes\hat{r}_y\otimes\hat{r}_y) \\ &= \left[\hat{r}_y^{-1}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F}')\hat{r}_y\otimes I\otimes I\right] + \left[I\otimes\hat{r}_y^{-1}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F}')\hat{r}_y\otimes I\right] + \left[I\otimes I\otimes\hat{r}_y^{-1}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F}')\hat{r}_y\right].\end{aligned} \tag{4.98}$$

A tarefa seguinte é, então, calcular a matriz $\hat{r}_y^{-1}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F}')\hat{r}_y$, onde $\mathbf{F}'=(A,\ 0,\ A_0')$ por (4.89). Assim, com algum esforço algébrico é possível inferir que

$$\hat{r}_y^{-1}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{F}')\hat{r}_y=\left[\exp\left(\frac{-i\theta}{2}\sigma_2\right)\right]^{-1}(A\sigma_1+A_0'\sigma_3)\exp\left(\frac{-i\theta}{2}\sigma_2\right)=A_0''\sigma_3, \tag{4.99}$$

onde foi definido

$$(A_0'')^2=(A_0')^2+A^2. \tag{4.100}$$

Consequentemente, a Hamiltoniana $\hat{H}''$ em (4.95), assume a forma

$$\hat{H}''=A_0''(\sigma_3\otimes I\otimes I\ +\ I\otimes\sigma_3\otimes I\ +\ I\otimes I\otimes\sigma_3)+\frac{1}{2}J(t)\left(\Gamma^{12}+\Gamma^{23}+\Gamma^{13}\right), \tag{4.101}$$

ou, de uma maneira ainda mais sintetizada,

$$\hat{H}''=\sum_{i=1}^{n=3}\mathbf{F}_i''\boldsymbol{\Sigma}^i+\frac{1}{2}J(t)\left(\Gamma^{12}+\Gamma^{23}+\Gamma^{13}\right),\quad \mathbf{F}_i''=(0,\ 0,\ A_0''),\quad i=1,2,3, \tag{4.102}$$

ou equivalentemente,

$$\hat{H}''=\sum_{i=1}^{n=3}\left(\mathbf{F}''\cdot\boldsymbol{\Sigma}^i\right)+\frac{1}{2}J(t)\left(\Gamma^{12}+\Gamma^{23}+\Gamma^{13}\right),\quad \mathbf{F}''=(0,\ 0,\ A_0''). \tag{4.103}$$

A menos do fato de que a componente $F''^{(z)}$ do campo externo acima é constante no tempo, a última Hamiltoniana é idêntica a do caso abordado na seção 4.2, de modo que o operador evolução temporal $\hat{U}''(t,t_0)$, tal que $\Psi''(t)=\hat{U}''(t,t_0)\Psi''(t_0)$, é

$$\begin{aligned}\hat{U}''(t,t_0)\ &=\ \left\{\prod_{k=1}^{3}\left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{A_0''\,(t-t_0)}{\hbar}\right)-i\left(\Sigma_z^k\right)\sin\left(\frac{A_0''\,(t-t_0)}{\hbar}\right)\right]\right\}\times\\ &\times\left[\mathbf{I}\cos\left(\frac{3}{2\hbar}J_I\right)-\frac{i}{3}\left(\Gamma^{12}+\Gamma^{23}+\Gamma^{13}\right)\sin\left(\frac{3}{2\hbar}J_I\right)\right],\end{aligned} \tag{4.104}$$

onde simplesmente substituiu-se $F_I(t)\equiv\int_{t_0}^{t}F(\tau)d\tau$ por $A_0''\,(t-t_0)$ em (4.40), lembrando que $\mathbf{I}$ é a matriz identidade 8×8 e que $J_I\,(t)\equiv\int_{t_0}^{t}J(\tau)d\tau$ por (4.34).

Finalmente, vale a pena recapitular que os vetores de estado

$$\begin{cases}\Psi(t)=\hat{U}(t,t_0)\Psi(t_0)\\ \Psi'(t)=\hat{U}'(t,t_0)\Psi'(t_0)\\ \Psi''(t)=\hat{U}''(t,t_0)\Psi''(t_0)\end{cases} \tag{4.105}$$

são soluções das equações de três spins (4.63), (4.70) e (4.94) respectivamente,

$$\begin{cases}\hat{H}\Psi=i\hbar\dot{\Psi}\\ \hat{H}'\Psi'=i\hbar\dot{\Psi}'\\ \hat{H}''\Psi''=i\hbar\dot{\Psi}''\end{cases} \tag{4.106}$$

e, além disso, são conectados pelas transformações (4.67) e (4.91)

$$\Psi(t) = \mathcal{R}_z(\omega t)\Psi'(t), \quad \Psi'(t) = \mathcal{R}_y(\theta)\Psi''(t), \tag{4.107}$$

o que implica em

$$\begin{aligned}
\Psi(t) &= \mathcal{R}_z(t)\Psi'(t) = \mathcal{R}_z(t)\underbrace{\mathcal{R}_y(\theta)\Psi''(t)}_{=\Psi'(t)} = \mathcal{R}_z(t)\mathcal{R}_y(\theta)\underbrace{\hat{U}''(t,t_0)\Psi''(t_0)}_{=\Psi''(t)} \\
&= \mathcal{R}_z(t)\mathcal{R}_y(\theta)\hat{U}''(t,t_0)\underbrace{\mathcal{R}_y^{-1}(\theta)\Psi'(t_0)}_{=\Psi''(t_0)} = \underbrace{\mathcal{R}_z(t)\mathcal{R}_y(\theta)\hat{U}''(t,t_0)\mathcal{R}_y^{-1}(\theta)\mathcal{R}_z^{-1}(t_0)}_{=\hat{U}(t,t_0)}\Psi(t_0), \qquad (4.108)
\end{aligned}$$

ou seja, o operador de evolução temporal para o análogo do problema de Rabi para um sistema de três spins 1/2 é então

$$\hat{U}(t,t_0) = \mathcal{R}_z(t)\mathcal{R}_y(\theta)\hat{U}''(t,t_0)\mathcal{R}_y^{-1}(\theta)\mathcal{R}_z^{-1}(t_0), \tag{4.109}$$

ou ainda, do fato de que $\mathcal{R}_z^{-1}(t_0 = 0) = \mathbf{I}$ (como em (3.11)),

$$\begin{aligned}
\hat{U}(t,t_0) &= \mathcal{R}_z(t)\mathcal{R}_y(\theta)U''(t,t_0)\mathcal{R}_y^{-1}(\theta)\underbrace{\mathcal{R}_z^{-1}(t_0)}_{=\mathbf{I}} = \\
&= \mathcal{R}_z(t)\mathcal{R}_y(\theta)U''(t,t_0)\mathcal{R}_y^{-1}(\theta), \qquad (4.110)
\end{aligned}$$

com U'' dado por(4.104).

4.5 O Ansatz de Bethe

Na atual seção é utilizado um método alternativo de se resolver o problema de três spins interagentes e congelados no espaço. Na verdade o método é válido para um número (finito) N qualquer de partículas colineares, mas aqui nós o aplicamos ao particular caso de três corpos.

O modelo permite a exata obtenção dos autovetores e, por consequência, os autovalores da matriz Hamiltoniana que descreve, via interação de Heisenberg [1], uma cadeia unidimensional (1D) de partículas de número quântico de spin $s = 1/2$ que interagem somente os spins adjacentes, i.e. os primeiros vizinhos. À este modelo dá-se o nome *Ansatz*[2] *de Bethe* por ter sido primeiramente apresentado em 1931 por Hans Bethe [19] .

O método alternativo de diagonalizar o operador Hamiltoniano, com a condição de contorno periódica $\mathbf{S}_{N+1} = \mathbf{S}_1$,

$$H = J\sum_{n=1}^{N}\mathbf{S}_n\cdot\mathbf{S}_{n+1} = J\sum_{n=1}^{N}\left[\frac{1}{2}\left(S_n^+S_{n+1}^- + S_n^-S_{n+1}^+\right) + S_n^zS_{n+1}^z\right] \tag{4.111}$$

é discutido em [12].

Segundo o método supra-citado, o primeiro passo é obter a representação matricial do operador H na base

$$\left\{\underbrace{|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle}_{r=0};\ \underbrace{|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle, |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle}_{r=1};\ \underbrace{|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle}_{r=2};\ \underbrace{|\downarrow\downarrow\downarrow\rangle}_{r=3}\right\} \tag{4.112}$$

[2] Do alemão "chute, palpite".

onde r é o número de spins para baixo em cada vetor da base:

$$H \rightarrow \begin{pmatrix} H_{(r=0)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & H_{(r=1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & H_{(r=2)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & H_{(r=3)} \end{pmatrix},$$

$$H_{(r=0)} \rightarrow \left(\langle\uparrow\uparrow\uparrow| H |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\right), \quad H_{(r=1)} \rightarrow \begin{pmatrix} \langle\downarrow\uparrow\uparrow| H |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle & \langle\downarrow\uparrow\uparrow| H |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle & \langle\downarrow\uparrow\uparrow| H |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\ \langle\uparrow\downarrow\uparrow| H |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle & \langle\uparrow\downarrow\uparrow| H |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle & \langle\uparrow\downarrow\uparrow| H |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\ \langle\uparrow\uparrow\downarrow| H |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle & \langle\uparrow\uparrow\downarrow| H |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle & \langle\uparrow\uparrow\downarrow| H |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \end{pmatrix}$$

$$H_{(r=2)} \rightarrow \begin{pmatrix} \langle\uparrow\downarrow\downarrow| H |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle & \langle\uparrow\downarrow\downarrow| H |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle & \langle\uparrow\downarrow\downarrow| H |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \\ \langle\downarrow\uparrow\downarrow| H |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle & \langle\downarrow\uparrow\downarrow| H |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle & \langle\downarrow\uparrow\downarrow| H |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \\ \langle\downarrow\downarrow\uparrow| H |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle & \langle\downarrow\downarrow\uparrow| H |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle & \langle\downarrow\downarrow\uparrow| H |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \end{pmatrix}, \quad H_{(r=3)} \rightarrow \left(\langle\downarrow\downarrow\downarrow| H |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle\right).$$

Nesta base, (4.112), o operador H é diagonal por blocos pois sua ação nos vetores da base não altera o número de spins pra baixo.

$$H \rightarrow J \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{3}{4} \end{pmatrix}.$$

O método sugere então que se reescreva a Hamiltoniana H (4.111) em termos da base:

$$(r=0) : \{|\psi_1\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$$

$$(r=1) : \begin{cases} |\psi_2\rangle = \left|\psi_{(m=0)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle\right) \\ |\psi_3\rangle = \left|\psi_{(m=1)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(e^{i\frac{2\pi}{3}} |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{i\frac{4\pi}{3}} |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle\right) \\ |\psi_4\rangle = \left|\psi_{(m=2)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(e^{i\frac{4\pi}{3}} |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{i\frac{8\pi}{3}} |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle\right) \end{cases}$$

$$(r=2) : \begin{cases} |\psi_5\rangle = \left|\psi_{(k_2=0)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle\right) \\ |\psi_6\rangle = \left|\psi_{(k_2=2\pi/3)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[-|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + \left(1+e^{i2\pi/3}\right)|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + \left(1+e^{-i2\pi/3}\right)|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle\right] \\ |\psi_7\rangle = \left|\psi_{(k_2=4\pi/3)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[-|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + \left(1+e^{i4\pi/3}\right)|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + \left(1+e^{-i4\pi/3}\right)|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle\right] \end{cases}$$

$$(r=3) : \{|\psi_8\rangle = |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle\,.$$

A representação matricial para o bloco $r=1$ do operador H na base $\{|\psi_2\rangle\,,\ |\psi_3\rangle\,,\ |\psi_4\rangle\}$ é:

$$H_{(r=1)} \rightarrow -\begin{pmatrix} -\frac{3J}{4} & 0 & 0 \\ 0 & J\left(\frac{1}{4}-\cos\frac{2\pi}{3}\right) & 0 \\ 0 & 0 & J\left(\frac{1}{4}-\cos\frac{4\pi}{3}\right) \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} -\frac{3J}{4} & 0 & 0 \\ 0 & +\frac{3J}{4} & 0 \\ 0 & 0 & +\frac{3J}{4} \end{pmatrix}.$$

A representação matricial para o bloco $r=2$ do operador H na base $\{|\psi_5\rangle\,,\ |\psi_6\rangle\,,\ |\psi_7\rangle\}$ é:

$$
H_{(r=2)} \rightarrow -\begin{pmatrix} -\frac{3J}{4} & 0 & 0 \\ 0 & J\left(\frac{1}{4}-\cos\frac{2\pi}{3}\right) & 0 \\ 0 & 0 & J\left(\frac{1}{4}-\cos\frac{4\pi}{3}\right) \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} -\frac{3J}{4} & 0 & 0 \\ 0 & +\frac{3J}{4} & 0 \\ 0 & 0 & +\frac{3J}{4} \end{pmatrix}
$$

A representação do operador H na base

$$
\left\{ \underbrace{|\psi_1\rangle}_{r=0};\ \underbrace{|\psi_2\rangle\ ,\ |\psi_3\rangle\ ,\ |\psi_4\rangle}_{r=1};\ \underbrace{|\psi_5\rangle\ ,\ |\psi_6\rangle\ ,\ |\psi_7\rangle}_{r=2};\ \underbrace{|\psi_8\rangle}_{r=3} \right\} \tag{4.113}
$$

é portanto:

$$
H \rightarrow -\begin{pmatrix}
-\frac{3J}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -\frac{3J}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & +\frac{3J}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & +\frac{3J}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{3J}{4} & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & +\frac{3J}{4} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & +\frac{3J}{4} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{3J}{4}
\end{pmatrix}.
$$

Uma vez que na base (4.113) o operador Hamiltoniano é diagonal, o operador de evolução temporal (2.10) é facilmente calculado e com uma transformação de similaridade conveniente é possível recuperar a solução (4.26).

Capítulo 5

Considerações Finais

Neste projeto estudamos sistemas quânticos não relativísticos de dois, quatro e oito níveis que descrevem partículas com spin $s = 1/2$ sujeitas a ação de campos externos e interagentes entre si. Tais sistemas possuem uma vasta aplicação em diversas áreas da física, dentre as quais destacamos a computação quântica. Apresentamos soluções exatas destes sistemas. Estudamos vários campos externos que permitam a construção de portas lógicas quânticas universais. Estas portas lógicas quânticas representam um elemento essencial no desenvolvimento dos chamados computadores quânticos. A análise e a implementação destes computadores quânticos exige a manipulação de sistemas de varios níveis, sujeitos a campos externos dependentes do tempo. Neste trabalho foi apresentada a solução para o assim chamado Problema de Rabi, um particular problema de dois níveis. Um exemplo de solução para o sistema de quatro níveis, aqui relativo a um problema de dois spins também foi discutido. Foram obtidas soluções exatas para sistemas de oito níveis cuja possível aplicação é a Correção Quântica de Erros lançando-se mão de dois diferentes métodos.

1. Os resultados aqui obtidos podem ser aplicados ao estudo de três pontos quânticos acoplados.

2. De posse das soluções exatas obtidas é possível verificar se elas obedecem condições suficientes e necessárias para a construção de portas lógicas quânticas. Veja a este respeito [20].

3. A partir das soluções é também possível investigar critérios de emaranhamento, que é um possível ingrediente para a construção dos Computadores Quânticos.

Apêndice A

Exponencial de Matrizes

A.1 Exponencial de uma Soma Matricial

Proposição. Se as matrizes A e B comutam, então

$$e^{A+B} = e^A e^B = e^B e^A.$$

Pela definição da função exponencial segue

$$\exp\left(M_1 + M_2\right) = I + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!}\left(M_1 + M_2\right)^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\left(M_1 + M_2\right)^k,$$

onde define-se que $\left(M_1 + M_2\right)^0 = I$. Por hipótese M_1 e M_2 comutam, de modo que vale a regra do binômio de Newton

$$\left(M_1 + M_2\right)^k = \sum_{l=0}^{k} \binom{k}{l} M_1^l M_2^{k-l}.$$

Então,

$$\exp\left(M_1 + M_2\right) = \sum_{k=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{k} \frac{1}{k!}\binom{k}{l} M_1^l M_2^{k-l} = \sum_{k=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{k} \frac{1}{l!(k-l)!} M_1^l M_2^{k-l}.$$

Logo

$$\exp\left(M_1 + M_2\right) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{k=l}^{\infty} \frac{1}{l!(k-l)!} M_1^l M_2^{k-l} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} M_1^l \left(\sum_{k=l}^{\infty} \frac{1}{(k-l)!} M_2^{k-l}\right),$$

pois é válida a seguinte regra de mudança de ordem de somas:

$$\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{k}\left(\cdots\right) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{k=l}^{\infty}\left(\cdots\right).$$

Fazendo a mudança de variável $m = k - l$, obtém-se

$$\sum_{k=l}^{\infty} \frac{1}{(k-l)!} M_2^{k-l} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} M_2^m = \exp\left(M_2\right).$$

Consequentemente,

$$\exp\left(M_1+M_2\right)=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{l!}M_1^l\exp\left(M_2\right)=\exp\left(M_1\right)\exp\left(M_2\right).$$

Analogamente se prova, *mutatis mutandis*, que

$$\exp\left(M_1+M_2\right)=\exp\left(M_2\right)\exp\left(M_1\right).$$

A.2 Fórmula do seno e cosseno

Da definição de exponencial matricial:

$$e^{iAx}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\left(iAx\right)^k=I+(iAx)+\frac{1}{2!}\left(iAx\right)^2+\frac{1}{3!}\left(iAx\right)^3+\frac{1}{4!}\left(iAx\right)^4+\frac{1}{5!}\left(iAx\right)^5+\frac{1}{6!}\left(iAx\right)^6+\frac{1}{7!}\left(iAx\right)^7+...$$

Se uma matriz A é tal que $A^2=I$, então

$$\begin{cases} A^n=I, & \text{se } n \text{ é par} \\ A^n=A, & \text{se } n \text{ é ímpar} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} e^{iAx} &= I+iAx-\frac{x^2}{2!}I-\frac{ix^3}{3!}A+\frac{x^4}{4!}I+\frac{ix^5}{5!}A-\frac{x^6}{6!}I-\frac{ix^7}{7!}A+\cdots= \\ &= \underbrace{I\left(1-\frac{x^2}{2!}+\frac{x^4}{4!}-\frac{x^6}{6!}+\cdots\right)}_{=\cos x}+iA\underbrace{\left(x-\frac{x^3}{3!}+\frac{x^5}{5!}-\frac{x^7}{7!}+\cdots\right)}_{=\sin x}= \\ &= I\cos x+iA\sin x. \end{aligned}$$

Apêndice B

O Produto de Kronecker

Define-se o produto de Kronecker $A \otimes B$ entre as matrizes $A \in \mathrm{Mat}(\mathbb{C}, m \times n)$ e $B \in \mathrm{Mat}(\mathbb{C}, p \times q)$ como

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & \cdots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \cdots & a_{mn}B \end{pmatrix}, \tag{B.1}$$

onde

$$a_{ij}B = \begin{pmatrix} a_{ij}b_{11} & a_{ij}b_{12} & \cdots & a_{ij}b_{1q} \\ a_{ij}b_{21} & a_{ij}b_{22} & \cdots & a_{ij}b_{2q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{ij}b_{p1} & a_{ij}b_{p2} & \cdots & a_{ij}b_{pq} \end{pmatrix}. \tag{B.2}$$

O produto $A \otimes B$ tem, portanto, dimensão $mp \times nq$.

A seguir são listadas algumas propriedades deste utilíssimo objeto matemático.

P1. Seja λ um escalar e $A,\ B,\ C$ matrizes, então o produto de Kronecker satisfaz as relações de bilinearidade e associatividade:

$$(A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C)\,, \tag{B.3}$$
$$(\lambda A) \otimes B = A \otimes (\lambda B) = \lambda\,(A \otimes B)\,, \tag{B.4}$$
$$A \otimes (B + C) = A \otimes B + A \otimes C, \tag{B.5}$$
$$(A + B) \otimes C = A \otimes C + B \otimes C. \tag{B.6}$$

P2. Propriedade do *produto misto* (o nome é sugestivo pois de fato trata-se de uma combinação entre o produto de Kronecker e o produto simples de matrizes):

$$(A \otimes B)\,(C \otimes D) = AC \otimes BD \tag{B.7}$$

desde que os produtos simples de matrizes AC e BD sejam possíveis.

P3. Propriedade da inversibilidade do produto de Kronecker: se as matrizes A e B são inversíveis, então

$$(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1}. \tag{B.8}$$

Mais que isso, o produto $A \otimes B$ é inversível se e somente se A e B são inversíveis.

P4. *Soma de Kronecker* $\oplus$ (não deve ser confundida com a soma direta) e algumas exponenciais úteis:

$$A_{(n\times n)},\ \ B_{(m\times m)}$$

$$A \oplus B := A \otimes I_m + I_n \otimes B \tag{B.9}$$

$$\exp\left(A \oplus B\right) = \left(\exp A\right) \otimes \left(\exp B\right) \tag{B.10}$$

$$\exp(I_m \otimes A) = I_m \otimes \left(\exp A\right) \tag{B.11}$$

$$\exp\left(A \otimes I_m\right) = \left(\exp A\right) \otimes I_m \tag{B.12}$$

P6. Vale a regra de Leibniz para o produto de Kronecker:

$$\frac{d}{dt}\left(A \otimes B\right) = \left[\left(\frac{d}{dt}A\right) \otimes B\right] + \left[A \otimes \left(\frac{d}{dt}B\right)\right]. \tag{B.13}$$

Apêndice C

Comutador para a Hamiltoniana Constante

$$
\begin{gathered}
\hat{H} = \underbrace{\mathbf{F}\cdot\left[\boldsymbol{\Sigma}^1 + \boldsymbol{\Sigma}^2 + \boldsymbol{\Sigma}^3\right]}_{=\hat{H}_{field}} + \underbrace{\frac{1}{2}J\left[\Gamma^{12} + \Gamma^{23} + \Gamma^{13}\right]}_{=\hat{H}_{int}} \\
\left[\Gamma^{mn}, \boldsymbol{\Sigma}^m + \boldsymbol{\Sigma}^n\right] = 0 \\
\boldsymbol{\Sigma}^m = \left(\Sigma^m_x, \Sigma^m_y, \Sigma^m_z\right) \\
\left[\Gamma^{mn}, \Sigma^m_x + \Sigma^n_x\right] = \left[\Gamma^{mn}, \Sigma^m_y + \Sigma^n_y\right] = \left[\Gamma^{mn}, \Sigma^m_z + \Sigma^n_z\right] = 0 \\
\left[\hat{H}_{field}, \hat{H}_{int}\right] = 0 \\
\Gamma^{12} = \sum_{i=1}^{3} \sigma_i \otimes \sigma_i \otimes I \ , \quad \Gamma^{23} = \sum_{i=1}^{3} I \otimes \sigma_i \otimes \sigma_i \ , \quad \Gamma^{13} = \sum_{i=1}^{3} \sigma_i \otimes I \otimes \sigma_i
\end{gathered} \tag{C.1}
$$

$$
\begin{gathered}
\left[\hat{H}_{field}, \hat{H}_{int}\right] = \left[\mathbf{F}\cdot\left(\boldsymbol{\Sigma}^1 + \boldsymbol{\Sigma}^2 + \boldsymbol{\Sigma}^3\right), \frac{1}{2}J\left(\Gamma^{12} + \Gamma^{23} + \Gamma^{13}\right)\right] = \\
= \underbrace{\left[\mathbf{F}\cdot\left(\boldsymbol{\Sigma}^1 + \boldsymbol{\Sigma}^2\right) + \mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\Sigma}^3, \frac{1}{2}J\Gamma^{12}\right]}_{1^{\text{o}}\ Comutador} + \\
+ \left[\mathbf{F}\cdot\left(\boldsymbol{\Sigma}^2 + \boldsymbol{\Sigma}^3\right) + \mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\Sigma}^1, \frac{1}{2}J\Gamma^{23}\right] + \\
+ \left[\mathbf{F}\cdot\left(\boldsymbol{\Sigma}^1 + \boldsymbol{\Sigma}^3\right) + \mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\Sigma}^2, \frac{1}{2}J\Gamma^{13}\right]
\end{gathered}
$$

Basta calcular o 1º comutador e o resultado será análogo para os outros dois:

$$
\begin{gathered}
\left[\mathbf{F}\cdot\left(\boldsymbol{\Sigma}^1 + \boldsymbol{\Sigma}^2\right) + \mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\Sigma}^3, \frac{1}{2}J\Gamma^{12}\right] = \\
\left[\mathbf{F}\cdot\left(\boldsymbol{\Sigma}^1 + \boldsymbol{\Sigma}^2\right), \frac{1}{2}J\Gamma^{12}\right] + \left[\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\Sigma}^3, \frac{1}{2}J\Gamma^{12}\right]
\end{gathered}
$$

agora

$$\left[\mathbf{F}\cdot\left(\boldsymbol{\Sigma}^1+\boldsymbol{\Sigma}^2\right),\frac{1}{2}J\Gamma^{12}\right]=\left[F^x\left(\Sigma_x^1+\Sigma_x^2\right)+F^y\left(\Sigma_y^1+\Sigma_y^2\right)+F^z\left(\Sigma_z^1+\Sigma_z^2\right),\frac{1}{2}J\Gamma^{12}\right]=$$

$$=\frac{1}{2}F^xJ\underbrace{\left[\Sigma_x^1+\Sigma_x^2,\ \Gamma^{12}\right]}_{=0}+\frac{1}{2}F^yJ\underbrace{\left[\Sigma_y^1+\Sigma_y^2,\ \Gamma^{12}\right]}_{=0}+\frac{1}{2}F^{zd}J\underbrace{\left[\Sigma_z^1+\Sigma_z^2,\ \Gamma^{12}\right]}_{=0}=0$$

no cálculo da espressão acima utilizou-se (C.1).Além disso,

$$\left[\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\Sigma}^3,\frac{1}{2}J\Gamma^{12}\right]=\frac{1}{2}J\left[F^x\left(I\otimes I\otimes\sigma_x\right)+F^y\left(I\otimes I\otimes\sigma_y\right)+F^z\left(I\otimes I\otimes\sigma_z\right),\sum_{i=1}^{3}\sigma_i\otimes\sigma_i\otimes I\right]$$

$$\boldsymbol{\sigma}=(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3)=(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$$

A partir da propriedade de produto misto (B.7) é possível inferir a nulidade do comutador $\left[\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\Sigma}^3,\frac{1}{2}J\Gamma^{12}\right]$:

$$\left[\mathbf{F}\cdot\boldsymbol{\Sigma}^3,\frac{1}{2}J\Gamma^{12}\right]=\frac{1}{2}F^xJ\underbrace{\left[I\otimes I\otimes\sigma_x,\sum_{i=1}^{3}\sigma_i\otimes\sigma_i\otimes I\right]}_{=0}+$$

$$+\frac{1}{2}F^yJ\underbrace{\left[I\otimes I\otimes\sigma_y,\sum_{i=1}^{3}\sigma_i\otimes\sigma_i\otimes I\right]}_{=0}+\frac{1}{2}F^zJ\underbrace{\left[I\otimes I\otimes\sigma_z,\sum_{i=1}^{3}\sigma_i\otimes\sigma_i\otimes I\right]}_{=0}=0$$

O cálculo para os outros dois comutadores é semelhante.

Apêndice D

Condição de Comutatividade em Tempos Diferentes para um Operador Hamiltoniano

$$\hat{H}(t) = \left(F(t)\sigma^3\right) \otimes I \otimes I \ + \ I \otimes \left(F(t)\sigma^3\right) \otimes I \ + \ I \otimes I \otimes \left(F(t)\sigma^3\right) + \frac{1}{2}J(t)\left[\Gamma^{12} + \Gamma^{23} + \Gamma^{13}\right]$$

$$\left[\hat{H}(t), \hat{H}(t')\right] = 0 \ \forall \ t, t'$$

É importante lembrar que neste caso ($n = 3$),

$$\Gamma^{12} = \sum_{i=1}^{3} \sigma^i \otimes \sigma^i \otimes I \ , \quad \Gamma^{23} = \sum_{i=1}^{3} I \otimes \sigma^i \otimes \sigma^i \quad \text{ e } \quad \Gamma^{13} = \sum_{i=1}^{3} \sigma^i \otimes I \otimes \sigma^i$$

$$\hat{H}(t) = F(t)\underbrace{\left(\sigma^3 \otimes I \otimes I \ + \ I \otimes \sigma^3 \otimes I \ + \ I \otimes I \otimes \sigma^3\right)}_{A} + \frac{1}{2}J(t)\underbrace{\left[\Gamma^{12} + \Gamma^{23} + \Gamma^{13}\right]}_{B}$$

A e B são matrizes constantes de modo que

$$\left[\hat{H}(t), \hat{H}(t')\right] = \left[F(t)A + \frac{1}{2}J(t)B \ , \ F(t')A + \frac{1}{2}J(t')B\right] =$$

$$= \left[F(t)A, \ F(t')A\right] + \left[F(t)A, \ \frac{1}{2}J(t')B\right] + \left[\frac{1}{2}J(t)B, \ F(t')A\right] + \left[\frac{1}{2}J(t)B, \ \frac{1}{2}J(t')B\right] =$$

$$= F(t)F(t')\underbrace{[A, \ A]}_{=0} + \frac{1}{2}F(t)J(t')\left[A, \ B\right] + \frac{1}{2}F(t')J(t)\left[B, \ A\right] + \frac{1}{4}J(t)J(t')\underbrace{[B, B]}_{=0} \tag{D.1}$$

Como em geral $\frac{1}{2}F(t)J(t') \neq \frac{1}{2}F(t')J(t)$ faz-se necessário o cálculo explícito do comutador $[A, \ B]$.

Mas, de fato, este comutador é um caso particular do comutador calculado no ítem anterior, de modo que

$$[A, \ B] = \left[\sigma^3 \otimes I \otimes I \ + \ I \otimes \sigma^3 \otimes I \ + \ I \otimes I \otimes \sigma^3, \ \Gamma^{12} + \Gamma^{23} + \Gamma^{13}\right] = 0$$

como esperávamos demonstrar.

Aternativamente poderíamos ter feito o cálculo explícito

$$[A,\ B] = \left[\sigma^3 \otimes I \otimes I \ + \ I \otimes \sigma^3 \otimes I \ + \ I \otimes I \otimes \sigma^3,\ \Gamma^{12} + \Gamma^{23} + \Gamma^{13}\right]$$

$$= \left[\sigma^3 \otimes I \otimes I \ + \ I \otimes \sigma^3 \otimes I \ + \ I \otimes I \otimes \sigma^3,\ \sum_{l=1}^{3} \sigma^l \otimes \sigma^l \otimes I \ + \sum_{l=1}^{3} I \otimes \sigma^l \otimes \sigma^l \ + \sum_{l=1}^{3} \sigma^l \otimes I \otimes \sigma^l\right] =$$

$$= \left[\sigma^3 \otimes I \otimes I\ ,\ \sum_{l=1}^{3} \sigma^l \otimes \sigma^l \otimes I\right] + \underbrace{\left[\sigma^3 \otimes I \otimes I\ ,\ \sum_{l=1}^{3} I \otimes \sigma^l \otimes \sigma^l\right]}_{=0} + \left[\sigma^3 \otimes I \otimes I\ ,\ \sum_{l=1}^{3} \sigma^l \otimes I \otimes \sigma^l\right] +$$

$$+ \left[I \otimes \sigma^3 \otimes I,\ \sum_{l=1}^{3} \sigma^l \otimes \sigma^l \otimes I\right] + \left[I \otimes \sigma^3 \otimes I,\ \sum_{l=1}^{3} I \otimes \sigma^l \otimes \sigma^l\right] + \underbrace{\left[I \otimes \sigma^3 \otimes I,\ \sum_{l=1}^{3} \sigma^l \otimes I \otimes \sigma^l\right]}_{=0} +$$

$$+ \underbrace{\left[I \otimes I \otimes \sigma^3,\ \sum_{l=1}^{3} \sigma^l \otimes \sigma^l \otimes I\right]}_{=0} + \left[I \otimes I \otimes \sigma^3,\ \sum_{l=1}^{3} I \otimes \sigma^l \otimes \sigma^l\right] + \left[I \otimes I \otimes \sigma^3,\ \sum_{l=1}^{3} \sigma^l \otimes I \otimes \sigma^l\right] =$$

$$= \sum_{l=1}^{3} \left[\sigma^3, \sigma^l\right] \otimes \sigma^l \otimes I + \sum_{l=1}^{3} \left[\sigma^3, \sigma^l\right] \otimes I \otimes \sigma^l + \sum_{l=1}^{3} \sigma^l \otimes \left[\sigma^3, \sigma^l\right] \otimes I +$$

$$+ \sum_{l=1}^{3} I \otimes \left[\sigma^3, \sigma^l\right] \otimes \sigma^l + \sum_{l=1}^{3} I \otimes \sigma^l \otimes \left[\sigma^3, \sigma^l\right] + \sum_{l=1}^{3} \sigma^l \otimes I \otimes \left[\sigma^3, \sigma^l\right] = 0$$

Apêndice E

Matrizes Sigma - Comutadores e Anti-comutadores

Notação usada neste trabalho:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{n} \mathbf{B}_i \mathbf{\Sigma}^i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n-1} J_{i(i+1)} \Gamma^{i(i+1)} + \frac{1}{2} J_{1,n} \Gamma^{1n},$$

$$\mathbf{\Sigma}^k = I^{\otimes(k-1)} \otimes \boldsymbol{\sigma} \otimes I^{\otimes(n-k)}, \qquad \Gamma^{ij} = \mathbf{\Sigma}^i \cdot \mathbf{\Sigma}^j$$

$$I = [I]_{2x2} \qquad , \quad \mathbf{B}_i = \mathbf{B}_i(t)$$

$$[\Sigma_i^r, \Sigma_j^s] = 2i\delta_{rs}\varepsilon_{ijk}\Sigma_k^r, \qquad [\Sigma_i^m, \Sigma_j^m]_+ = 2\delta_{ij}. \tag{E.1}$$

Prova das relações de comutação:
Afim de demonstrá-las serão usadas as propriedades das matrizes de Pauli a saber

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \ , \quad [\sigma_i, \sigma_j]_+ = 2\delta_{ij}, \tag{E.2}$$

onde ε_{ijk} é o símbolo de Levi-CivitaE.2.
Para o comutador em (E.1), o caso $r \neq s$ é óbvio, portanto só calcularemos o caso contrário:

$$\begin{aligned}
[\Sigma_i^m, \Sigma_j^m] &= \left[I^{\otimes(m-1)} \otimes \sigma_i \otimes I^{\otimes(n-m)},\ I^{\otimes(m-1)} \otimes \sigma_j \otimes I^{\otimes(n-m)}\right] = \\
&= \left(I^{\otimes(m-1)} \otimes \sigma_i \otimes I^{\otimes(n-m)}\right)\left(I^{\otimes(m-1)} \otimes \sigma_j \otimes I^{\otimes(n-m)}\right) \\
&\quad - \left(I^{\otimes(m-1)} \otimes \sigma_j \otimes I^{\otimes(n-m)}\right)\left(I^{\otimes(m-1)} \otimes \sigma_i \otimes I^{\otimes(n-m)}\right) \\
&= \left(I^{\otimes(m-1)} I^{\otimes(m-1)} \otimes \sigma_i\sigma_j \otimes I^{\otimes(n-m)} I^{\otimes(n-m)}\right) - \left(I^{\otimes(m-1)} I^{\otimes(m-1)} \otimes \sigma_j\sigma_i \otimes I^{\otimes(n-m)} I^{\otimes(n-m)}\right) \\
&= \left(I^{\otimes(m-1)} \otimes \sigma_i\sigma_j \otimes I^{\otimes(n-m)}\right) - \left(I^{\otimes(m-1)} \otimes \sigma_j\sigma_i \otimes I^{\otimes(n-m)}\right)
\end{aligned}$$

pois $I^{\otimes(m-1)} I^{\otimes(m-1)} = I^{\otimes(m-1)}$ e $I^{\otimes(n-m)} I^{\otimes(n-m)} = I^{\otimes(n-m)}$.
Assim,

$$[\Sigma_i^m, \Sigma_j^m] = \left(I^{\otimes(m-1)} \otimes (\sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i) \otimes I^{\otimes(n-m)}\right)$$

$$= \left(I^{\otimes(m-1)} \otimes 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \otimes I^{\otimes(n-m)}\right) = 2i\varepsilon_{ijk}\left(I^{\otimes(m-1)} \otimes \sigma_k \otimes I^{\otimes(n-m)}\right) = 2i\varepsilon_{ijk}\Sigma_k^m.$$

Anticomutador

$$[\Sigma_i^m, \Sigma_j^m]_+ = 2\delta_{ij}$$

$$\begin{aligned}
[\Sigma_i^r, \Sigma_j^r]_+ = \quad & \left[I^{\otimes(r-1)} \otimes \sigma_i \otimes I^{\otimes(n-r)}\ , \quad I^{\otimes(r-1)} \otimes \sigma_j \otimes I^{\otimes(n-r)}\ \right]_+ \\
= \quad & \left(I^{\otimes(r-1)} \otimes \sigma_i \otimes I^{\otimes(n-r)}\right)\left(I^{\otimes(r-1)} \otimes \sigma_j \otimes I^{\otimes(n-r)}\right) \\
& + \left(I^{\otimes(r-1)} \otimes \sigma_j \otimes I^{\otimes(n-r)}\right)\left(I^{\otimes(r-1)} \otimes \sigma_i \otimes I^{\otimes(n-r)}\right) \\
= \quad & \left(I^{\otimes(r-1)}I^{\otimes(r-1)} \otimes \sigma_i\sigma_j \otimes I^{\otimes(n-r)}I^{\otimes(n-r)}\right) + \left(I^{\otimes(r-1)}I^{\otimes(r-1)} \otimes \sigma_j\sigma_i \otimes I^{\otimes(n-r)}I^{\otimes(n-r)}\right) \\
= \quad & \left(I^{\otimes(r-1)} \otimes \sigma_i\sigma_j \otimes I^{\otimes(n-r)}\right) + \left(I^{\otimes(r-1)} \otimes \sigma_j\sigma_i \otimes I^{\otimes(n-r)}\right) \\
= \quad & \left(I^{\otimes(r-1)} \otimes \underbrace{(\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i)}_{=2I\delta_{ij}} \otimes I^{\otimes(n-r)}\right) \\
= \quad & 2\delta_{ij}\left(I^{\otimes(r-1)} \otimes I \otimes I^{\otimes(n-r)}\right) = 2\delta_{ij}.
\end{aligned}$$

Referências Bibliográficas

[1] W. Heisenberg, Z. Phys. **38**, 441 (1926).

[2] V.G. Bagrov, D.M. Gitman, M.C. Baldiotti and A.D. Levin. Spin equation and its solutions.*Ann. Phys.*(Leipzig) **14**, No. 11-12, 764-789(2006).

[3] V.G. Bagrov, M.C. Baldiotti, D.M. Gitman and A.D. Levin. Two interacting spins in external fields. Four-level systems. *AnnalenPhys.***16**:274-285,2007

[4] Nielsen M.A., Chuang I.L., *Quantum Computation and Quantum Information*, (Cambridge University Press, Cambridge 2000)

[5] M. Le Bellac, *Quantum Information and Quantum Computation*, (Cambridge University Press, Cambridge 2006)

[6] Deutch D., *Quantum theory, the Church-Turing principle and the universal quantum computer*, Proc. Soc. London Ser. A **400**, 97 (1985)

[7] Shor P.W., *Proceedings of the 35th Annual Symposium on the Foundations of Computer Science* (IEEE Computer Society, Los Alamitos, 1995) p.125

[8] Grover L., *A fast quantum mechanical algorithm for database search*, Proceedings of STOC , Philadelphia, 212-219 (1996)

[9] A. Ardavan, G. A. D. Briggs *Quantum control in spintronics* Phil. Trans R. Soc. A (2011) **369**, 3229-3248.

[10] Rabi I.I., Phys. Rev. **51**, 652 (1937).

[11] Rabi I.I., Ramsey N.F., Schwinger J., *Use of Rotating Coordinates in Magnetic Resonance Problems*, *Rev. Mod. Phys.* **26**, 167 (1945)

[12] Michael Karbach and Gerhard Müller. Introduction to the Bethe Ansatz I. (July 10, 2004) *Computers in Physics* **11**, 36 (1997)

[13] W. Pauli, Zeit. Phys. **43**, 601 (1927)

[14] M.C. Baldiotti, D.M. Gitman. Four-level systems and a universal quantum gate. (2008)

[15] M.C. Baldiotti, V.G. Bagrov, D.M. Gitman, A.D. Levin. Two and four-level systems in magnetic fields restricted in time. (2008)

[16] M.C. Baldiotti, V.G. Bagrov, D.M. Gitman, A.D. Levin. Two- and Four-Level Systems in Magnetic Fields. Brazilian Journal of Physics, 41, pp. 71-77, (2011)

[17] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics* Revised version. Addison-Wesley. (1994).

[18] J. C. A. Barata. *Curso de Física-Matemática*. E-book. (2012)

[19] H. Bethe, Z. Phys. **71**, 205 (1931), *Zur Theorie der Metalle. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette*

[20] M. J. Bremner et al., Phys. Rev. Lett. **89**, 247902 (2002).